



Optimisation topologique des transferts de chaleur et de masse : application aux échangeurs de chaleur

Gilles Marck

► To cite this version:

Gilles Marck. Optimisation topologique des transferts de chaleur et de masse : application aux échangeurs de chaleur. Autre. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2012. Français. NNT : 2012ENMP0041 . pastel-00819099

HAL Id: pastel-00819099

<https://pastel.archives-ouvertes.fr/pastel-00819099>

Submitted on 30 Apr 2013

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

École doctorale n°432 : Sciences des Métiers de l'Ingénieur

Doctorat européen ParisTech

T H È S E

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'École nationale supérieure des Mines de Paris

Spécialité « Énergétique »

présentée et soutenue publiquement par

Gilles MARCK

le 21 Décembre 2012

Optimisation Topologique des Transferts de Chaleur et de Masse
- Application aux Échangeurs de Chaleur -

Topological Optimization of Heat and Mass Transfer
- Application to Heat Exchangers -

Directeurs de thèse : **Jean-Luc HARION**
Denis CLODIC

Co-encadrement de thèse : **Maroun NEMER**

| | |
|---|--------------------|
| M. Jocelyn BONJOUR , Professeur, Directeur adjoint du CETHIL, INSA de Lyon | Rapporteur |
| M. Denis CLODIC , Directeur de recherche émérite au CEP, MINES ParisTech | Directeur de thèse |
| M. Jean-Luc HARION , Professeur, Directeur du DEI, Ecole des Mines de Douai | Directeur de thèse |
| M. Guy LAURIAT , Professeur des Universités, Laboratoire de MSME, Université Paris-Est | Examineur |
| Mme Lingai LUO , Directeur de recherche CNRS, LTN, Université de Nantes | Rapporteur |
| M. Maroun NEMER , Directeur du CEP Palaiseau, MINES ParisTech | Examineur |
| M. Yannick PRIVAT , Chargé de recherche, IRMAR éq. d'Analyse Numérique, ENS Cachan | Examineur |

MINES ParisTech
Centre Énergétique et Procédés
5 rue Léon Blum, 91120 Palaiseau, France

Ecole des Mines de Douai
Département Énergétique Industriel
941 Rue Charles Bourseul, 59500 Douai, France

**T
H
È
S
E**

Il faut choisir, se reposer ou être libre.

Thucydide

Remerciements

La présente thèse est le fruit d'un travail de recherche auquel de nombreuses personnes ont pris part et je souhaite ici leur adresser mes remerciements les plus sincères. Leur engagement à mes côtés m'a permis de surmonter les différentes épreuves scientifiques et humaines inhérentes au doctorat. Je tiens particulièrement à remercier :

- Jean-Luc Harion, mon directeur de thèse et directeur du DEI, pour son encadrement, son implication et sa confiance à mon égard. J'ai eu la chance d'apprécier tour à tour ses talents pédagogiques en tant qu'étudiant et ses qualités scientifiques et humaines en tant que docteur. Je lui suis infiniment reconnaissant de m'avoir accompagné et soutenu au cours de ces dernières années.
- Denis Clodic, mon directeur de thèse et directeur de recherche émérite au CEP MINES Paris-Tech, pour m'avoir accueilli au sein de son équipe de recherche et avoir contribué à l'orientation de mes travaux.
- Maroun Nemer, mon encadrant de thèse et directeur du CEP Palaiseau, pour ses conseils et sa volonté de m'ouvrir à des problématiques et thématiques plus larges que celles abordées dans le présent manuscrit.
- Lingai Luo et Jocelyn Bonjour, qui m'ont fait l'honneur d'être les rapporteurs de mes travaux de thèse, ainsi que Guy Lauriat et Yannick Privat, qui ont accepté de les examiner.
- Vincent Kubicki, docteur en mécanique des fluides numériques, qui m'a notamment initié aux concepts mathématiques utilisés dans cette thèse. Ses nombreuses réflexions sur mes travaux se sont toujours révélées riches et pertinentes et m'ont souvent permis d'économiser un temps précieux.
- Arnaud Kervern et Jérémie Humeau, ingénieurs informatiques, qui m'ont formé aux différents outils informatiques sur lesquels j'ai fondé l'ensemble de mes développements numériques. Ils ont tous deux contribué significativement à mes recherches en m'orientant vers les méthodes et outils informatiques appropriés à la résolution de mes problèmes.
- Anne-Marie Bonnet, ancienne responsable administrative du CEP Palaiseau, qui a corrigé avec exactitude et minutie le présent manuscrit de thèse et a également grandement contribué à perfectionner le style de mes différentes publications.
- Rocio Valdez Carranza, Marie-Astrid Krames, Philomène Angelosanto et Joëlle Andrianarijaona, membres actives de l'équipe administrative du CEP Palaiseau, qui ont toujours répondu avec diligence et gentillesse à mes demandes, aussi diverses et variées soient-elles.
- Michèle et Roland Marck, mes parents, pour leur confiance et leur soutien inconditionnel tout au long de mes études.
- Alexia Kis-Marck, mon épouse, pour son exceptionnelle générosité et son intelligence remarquable : ses encouragements et son soutien sans faille m'ont apporté un réconfort inestimable, qui a été la clef de mes recherches. Ce manuscrit lui est dédié, avec tout mon amour.

Table des matières

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Introduction générale | 1 |
| 1.1 | Contexte et enjeux | 1 |
| 1.2 | Introduction aux problématiques de l'optimisation | 2 |
| 1.2.1 | Paramétrage des structures | 2 |
| 1.2.2 | Classification des algorithmes | 4 |
| 1.2.3 | Revue bibliographique | 6 |
| 1.3 | Méthodologie | 7 |
| 1.3.1 | Résolution des équations aux dérivées partielles | 8 |
| 1.3.2 | Optimisation des transferts de masse et de chaleur | 8 |
| 1.3.3 | Remarques | 9 |
| I | Optimisation topologique des échanges de chaleur en conduction | 11 |
| 2 | Théorie constructale | 13 |
| 2.1 | Abstract | 13 |
| 2.2 | Introduction | 13 |
| 2.3 | A comparative review of two constructal methodologies | 15 |
| 2.3.1 | Optimization of the elemental volume | 15 |
| 2.3.2 | Optimization of the first order construct | 16 |
| 2.3.3 | Optimization of the higher order constructs | 18 |
| 2.4 | Analytical perspectives | 19 |
| 2.4.1 | High-conductivity material and heat generation | 19 |
| 2.4.2 | Fraction of high-conductivity material | 23 |
| 2.5 | Comparison of constructal designs | 26 |
| 2.5.1 | Presentation of the problem | 27 |
| 2.5.2 | Equivalence between ϕ and n_1 | 27 |
| 2.5.3 | Recurrence relations of the constructal problem | 28 |
| 2.5.3.1 | Recurrence relation of the square constructal problem [83] | 28 |
| 2.5.3.2 | Recurrence relation of the rectangular constructal problem [102] | 29 |
| 2.5.4 | Solver and mesh | 31 |
| 2.5.5 | Results | 33 |
| 2.6 | Conclusion | 35 |
| 2.7 | Building algorithm | 36 |
| 2.8 | Conclusion à propos de l'approche constructale | 37 |
| 3 | Automates cellulaires | 39 |
| 3.1 | Evolution structurelle par attraction locale | 40 |
| 3.1.1 | Introduction | 41 |
| 3.1.2 | Principes de fonctionnement | 43 |
| 3.1.2.1 | Algorithme | 43 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 3.1.2.2 | Pseudo-fonctions objectif | 45 |
| 3.1.3 | Résultats | 47 |
| 3.1.3.1 | Analyse de la convergence | 47 |
| 3.1.3.2 | Influence des paramètres numériques et physiques | 50 |
| 3.1.4 | Limitations | 57 |
| 3.1.4.1 | Discontinuité du domaine hautement conducteur | 57 |
| 3.1.4.2 | Dissociation des automates cellulaires et des volumes finis | 58 |
| 3.1.5 | Comparaison avec la théorie constructale | 60 |
| 3.1.6 | Conclusion | 64 |
| 3.2 | Evolutionary Structural Optimization by extension | 65 |
| 3.2.1 | Introduction | 65 |
| 3.2.2 | Evolutionary Structural Optimization by extension | 66 |
| 3.2.2.1 | Problem introduction | 66 |
| 3.2.2.2 | Setting up algorithm | 67 |
| 3.2.3 | Results and discussion | 69 |
| 3.2.3.1 | Shape of cooling networks | 70 |
| 3.2.3.2 | History of construction | 70 |
| 3.2.4 | Comparison between ESO and constructal methods | 71 |
| 3.2.5 | Conclusion | 74 |
| 3.3 | Conclusion à propos des automates cellulaires | 75 |
| 4 | Solid Isotropic Material with Penalization | 77 |
| 4.1 | Abstract | 77 |
| 4.2 | Introduction | 77 |
| 4.3 | SIMP presentation | 80 |
| 4.3.1 | Introduction to SIMP | 80 |
| 4.3.1.1 | Penalization process | 81 |
| 4.3.1.2 | Checkerboard problems | 84 |
| 4.3.2 | Finite Volume Method | 84 |
| 4.3.3 | Sensitivity analysis | 87 |
| 4.3.3.1 | Average temperature | 87 |
| 4.3.3.2 | Variance temperature | 88 |
| 4.3.3.3 | Additional comments on sensitivity analysis | 89 |
| 4.3.4 | Sensitivity filter | 92 |
| 4.3.5 | Method of Moving Asymptotes (MMA) | 93 |
| 4.4 | Multi-objective optimization | 93 |
| 4.5 | Results | 94 |
| 4.5.1 | Convergence process | 94 |
| 4.5.2 | Influence of numerical parameters | 98 |
| 4.5.2.1 | Mesh independence analysis | 98 |
| 4.5.2.2 | Numerical filter analysis | 99 |
| 4.5.2.3 | Sensitivity filter analysis | 99 |
| 4.5.2.4 | Influence of heat generation rate | 100 |
| 4.5.3 | Multi-objective results | 101 |
| 4.6 | Conclusion | 104 |
| 4.7 | Remarques complémentaires | 105 |
| 4.7.1 | Conditions limites du filtre numérique | 105 |
| 4.7.2 | Influence de la porosité $\bar{\phi}$ | 108 |
| 4.7.3 | Conditions limites thermiques complémentaires | 108 |
| 4.8 | Comparaison entre les différentes approches | 112 |
| 4.9 | Conclusion à propos de l'approche SIMP | 115 |

| | | |
|-----------|--|------------|
| II | Optimisation topologique des échanges de chaleur conducto-convectifs | 117 |
| 5 | Optimisation topologique des transferts de masse et de chaleur : régime laminaire | 119 |
| 5.1 | Abstract | 119 |
| 5.2 | Introduction | 119 |
| 5.3 | Topology optimization for heat and mass transfer | 123 |
| 5.3.1 | Topology optimization analysis | 124 |
| 5.3.1.1 | Problem formulation | 124 |
| 5.3.1.2 | Algorithmic scheme | 125 |
| 5.3.2 | Finite Volume Method | 127 |
| 5.3.2.1 | Modified FVM formulation | 128 |
| 5.3.2.2 | Shear force correction for solid domain | 131 |
| 5.3.3 | Sensitivity analysis | 133 |
| 5.3.3.1 | General formulation | 134 |
| 5.3.3.2 | Objective functions | 136 |
| 5.3.3.3 | Multi-objective optimization | 136 |
| 5.3.4 | Method of Moving Asymptotes | 137 |
| 5.4 | Results | 138 |
| 5.4.1 | Diffuser | 138 |
| 5.4.2 | Bend pipe | 139 |
| 5.4.3 | Double pipe | 140 |
| 5.4.4 | Single pipe with constant wall temperature | 141 |
| 5.5 | Conclusion and perspectives | 146 |
| 5.6 | Limitations de l'approche par homogénéisation | 146 |
| 5.7 | Conclusion à propos de l'optimisation des transferts de masse et de chaleur | 148 |
| 6 | Conclusion et perspectives | 151 |
| 6.1 | Conclusion | 151 |
| 6.2 | Perspectives | 152 |
| 6.2.1 | Automates cellulaires | 152 |
| 6.2.2 | Méthodes d'homogénéisation | 152 |
| 6.2.2.1 | Optimisation des transferts de chaleur par conduction | 153 |
| 6.2.2.2 | Optimisation des transferts de masse et de chaleur | 154 |

Liste des figures

| | | |
|------|--|----|
| 1.1 | Illustration de trois types de paramétrages différents utilisés par le processus d'optimisation, de la structure initiale au résultat. | 3 |
| 2.1 | Slender elemental volume and its characteristics. | 15 |
| 2.2 | First construct of elemental volumes. | 17 |
| 2.3 | Geometrical comparison between Bejan and Ghodoossi & Egrican approaches for the first four construct levels. | 19 |
| 2.4 | Heat transfer balance in a differential element of the the high-conductivity path. . . | 21 |
| 2.5 | Comparison of r_{opt} and $R_{0,min}$ between this work, Kuddusi & Denton and Bejan approaches for $\hat{k} = 400$ | 23 |
| 2.6 | First four assembly levels showing the deep gray areas which are included twice in the classical approach. | 25 |
| 2.7 | ϕ_i error in function of the assembly level ℓ and n_1 by taking into account the crossing between the constructal levels. | 26 |
| 2.8 | Algorithm used to build a set of constructal shapes. | 30 |
| 2.9 | Grid used through k_p material to evaluate the temperature field. | 32 |
| 2.10 | Comparison of the efficiency of constructal shapes. | 34 |
| 2.11 | Constructor of <code>sys</code> object. | 36 |
| 2.12 | Constructor of <code>link</code> object. | 37 |
| 3.1 | Mise en évidence du lien entre les variables de contrôle et la distribution des conductivités thermiques k_p et k_0 dans le domaine de calcul. | 42 |
| 3.2 | Quatre étapes clefs de la modification de la structure par l'attraction locale de la matière basée sur la norme du flux de chaleur. | 44 |
| 3.3 | Algorithme de modification de la structure par l'attraction locale de la matière basée sur le gradient température. | 46 |
| 3.4 | Evolution de la convergence structurelle au fil des itérations. | 48 |
| 3.5 | Evolution des principaux paramètres physiques de la structure. | 49 |
| 3.6 | Structures obtenues à partir de 4 maillages différents. | 51 |
| 3.7 | Influence du filtre numérique utilisé pour établir la conductivité thermique \tilde{k} | 53 |
| 3.8 | Influence du taux de génération de chaleur q_p au sein du matériau hautement conducteur. | 53 |
| 3.9 | Influence de la porosité maximale ϕ variant entre 0,5% et 40% sur la structure finale. | 55 |
| 3.10 | Influence du rapport de conductivité \hat{k} variant entre 2 et 400 sur la structure finale. | 56 |
| 3.11 | Mise en exergue de la problématique des <i>checkerboards</i> pour la méthode des automates cellulaires. | 58 |
| 3.12 | Schématisation de deux critères de permutation des matériaux k_0 et k_p | 59 |
| 3.13 | Comparaison de l'influence du critère de permutation interne ou externe. | 61 |
| 3.14 | Comparaison des structures constructales avec les automates cellulaires basés sur des critères de permutation interne. | 63 |
| 3.15 | Physical and geometrical description of a rectangular finite-size volume including k_p material and k_0 material with a structured mesh. | 67 |
| 3.16 | Specific ESO algorithm used in the present study. | 68 |

| | | |
|------|---|-----|
| 3.17 | Operations of the parallel ESO algorithm on 4 cores. | 69 |
| 3.18 | Cooling network with a $2mm$ heat sink and a porosity of $\phi = 15\%$ | 70 |
| 3.19 | Construction vizualisation of a k_p network cooling a square volume generating heat pictured in function of the porosity of the finite-size volume. | 72 |
| 3.20 | History of construction highlighting the outstanding points with their respective geometry and porosity. | 73 |
| 3.21 | Comparison between two constructal geometries and their associated ESO solution. | 74 |
| 4.1 | Finite-size volume generating heat (q, k_0) cooled thanks to a high conductivity structure (k_p) with an arbitrary shape. | 81 |
| 4.2 | Integration of penalization process into SIMP strategy. | 83 |
| 4.3 | Staggered strategy with cartesian grid for SIMP method: 3×3 design parameters beside 4×4 temperature scalars. | 84 |
| 4.4 | Direct and derivative evaluation of $A_{h/v}$ and A_p coefficients. | 86 |
| 4.5 | Antecedents required for evaluating sensitivity $df_{vr}/d\eta_h$ based on average temperature and its derivative with respect to η_h | 89 |
| 4.6 | Influence of penalization parameter p on convex function $q(\eta)$ for $p = 1, 2, 4, 8, 16$ | 90 |
| 4.7 | Direct and derivative evaluation of S_u coefficients. | 91 |
| 4.8 | Impact of filtering on the sensitivity field in the frame of a reduced checkerboard problem. | 92 |
| 4.9 | Results of main penalization steps during the optimization process. | 95 |
| 4.10 | Evaluation of penalization parameter and objective function for each iteration step. | 96 |
| 4.11 | Comparison of f_{av} and f_{vr} minimization and mesh independence analysis. | 97 |
| 4.12 | Analysis of SIMP results. | 100 |
| 4.13 | Samples of high conductivity structures from (f_{av}, f_{vr}) minimization, sorted by porosity $\bar{\phi}$ and weighting w | 102 |
| 4.14 | Influence of local optima. | 103 |
| 4.15 | Pareto frontiers of (f_{av}, f_{vr}) minimization problem. | 104 |
| 4.16 | Correction de l'effet de bord lors du filtrage de la sensibilité. | 106 |
| 4.17 | Effet de bord du filtre sur la sensibilité. | 107 |
| 4.18 | Simulation de croissance structurelle en fonction de $\bar{\phi}$ pour $\min f_{av}$ | 109 |
| 4.19 | Influence de la porosité maximale $\bar{\phi}$ sur la fonction objectif f_{av} | 110 |
| 4.20 | Exemple de structure obtenue à partir de géométries et conditions limites différentes. | 111 |
| 4.21 | Comparaison des approches constructales, par automates cellulaires et homogénéisation ($n_1 = 6$). | 113 |
| 4.22 | Comparaison des approches constructales, par automates cellulaires et homogénéisation ($n_1 = 8$). | 114 |
| 5.1 | Illustration of Ω domain and its boundary conditions. | 124 |
| 5.2 | Integration of both penalization processes into SIMP strategy. | 126 |
| 5.3 | Staggered grid and discretization coefficients for FVM. | 129 |
| 5.4 | Test case recreating the Poiseuille flow conditions between two solid domains. | 132 |
| 5.5 | θ -values involved in the correction process of $S_p^{i,j}$ terms for u - and v -velocities. | 133 |
| 5.6 | Binary representation of the two main matrices involved in the adjoint problem for a 5×5 design grid. | 135 |
| 5.7 | Minimization of the pressure drop for a diffuser. | 138 |
| 5.8 | Minimization of the pressure drop for a bend pipe. | 139 |
| 5.9 | Total dissipated power minimization for two different cases of double pipe. | 141 |
| 5.10 | Physical and geometrical configurations of the single-pipe case, with top and bottom constant wall temperature. | 142 |
| 5.11 | Single pipe with constant wall temperature: structures going from f_d minimization to f_r maximization sorted by weighting w | 143 |

| | | |
|------|--|-----|
| 5.12 | Single pipe with constant wall temperature: Pareto frontier ($\min f_d, \max f_r$). | 144 |
| 5.13 | Qualitative performance analysis of structure reached for $w = 0.60$, revised with an unified core. | 145 |
| 5.14 | Coude soumis à une température constante dans son coin Nord-Est. | 147 |

Chapitre 1

Introduction générale

1.1 Contexte et enjeux

Les échangeurs de chaleur sont des composants prépondérants du secteur industriel. La majorité des activités de transformation nécessite, à un stade de leur processus, un échange de chaleur, que cela soit pour évacuer une énergie excédentaire, réaliser un changement de phase, ou être converti en travail. De nombreux travaux prenant des formes diverses ont été conduits dans le but de les optimiser, c'est-à-dire de les rendre plus compacts, plus légers et plus performants en terme de transfert. A titre d'exemple, dans le cadre des échangeurs embarqués tels que ceux employés dans les véhicules terrestres ou aériens, le gain de poids est une préoccupation centrale puisqu'elle engendre une économie lors du fonctionnement, en plus de celle réalisée lors de la conception, comme en témoigne Vargas et Bejan [1].

L'optimisation des échanges de chaleur peut être abordée selon plusieurs angles, dépendant de l'échelle à laquelle le système thermique est considéré. Dans le contexte industriel, l'optimisation des échanges thermiques relatifs à un processus est souvent le synonyme de la recherche d'un agencement idéal des organes d'échange, tout en assurant un dimensionnement macroscopique optimal de chaque sous-système. Dans le contexte automobile, l'interaction entre le radiateur externe, le circuit de refroidissement et les chambres de combustion, joue un rôle déterminant pour le rendement thermodynamique du moteur. Un raisonnement similaire pourrait être conduit à propos des climatiseurs, pompes à chaleur, fours industriels ou toute autre dispositif qui est le siège d'un phénomène thermodynamique. Fort de ce constat, l'intérêt pour des méthodologies d'optimisation indépendantes de la géométrie prédéfinie de l'organe d'échange s'avère croissant, puisque celles-ci permettent d'aborder des configurations totalement différentes en s'affranchissant des contraintes lourdes inhérentes au paramétrage des formes.

La présente thèse envisage l'optimisation des échangeurs de chaleur à une échelle plus fine que celle visant à l'organisation globale des flux. L'idée principale est d'établir une méthodologie permettant de repenser la géométrie interne des échangeurs en vue de performances thermiques optimales. Par géométrie interne, il convient d'entendre la plus petite échelle de transfert qu'il est possible de prendre en compte au sein d'un réseau global d'échanges, telle que la forme de l'interface fluide/solide par exemple. En effet, l'optimisation des sous-systèmes se pose logiquement comme pré-requis à l'optimisation d'un agencement global fondé sur chacun d'entre-eux. Dès lors, les questions suivantes se posent : quels critères d'évaluation des performances ? Quelles méthodes d'optimisation ? Quelles hypothèses physiques ? Quels outils de résolution numérique des équations aux dérivées partielles ? C'est autour de ces questions que les travaux de thèse sont développés, afin d'examiner les méthodes existantes et d'en construire de nouvelles, tout en gardant à l'esprit l'intérêt de déboucher sur des résultats concrets et applicables.

1.2 Introduction aux problématiques de l'optimisation

L'optimisation de structures est un sujet qui occupe de nombreux domaines physiques différents, de la mécanique du solide à l'électromagnétisme, et dont la caractérisation se révèle délicate tant ses formulations peuvent revêtir des aspects différents. Deux classifications complémentaires sont proposées dans cette section, afin d'établir une grille de lecture permettant d'analyser les travaux de la communauté scientifique dans le domaine de l'optimisation structurelle des échanges de masse et de chaleur. D'une part, une distinction portant sur la façon de paramétrer les géométries est présentée, et d'autre part, une distribution portant sur la nature intrinsèque des algorithmes d'optimisation est établie.

1.2.1 Paramétrage des structures

Le premier type de classification porte sur le nombre de degrés de liberté que possède les géométries sujettes au processus d'optimisation. En s'appuyant sur la philosophie détaillée par Bendsøe et Sigmund [2], trois types d'optimisation structurelle sont discernables : l'optimisation de taille, de forme et topologique, citées par degré de liberté croissant. L'optimisation de taille présuppose l'existence d'une structure dont certaines caractéristiques peuvent varier sans en changer fondamentalement l'architecture. La méthode consiste à déterminer les valeurs des paramètres qui satisfont les fonctions objectif, tout en sachant que la forme finale de la structure sera fondamentalement proche du paramétrage initial. L'optimisation de forme introduit un degré de liberté supplémentaire dans le processus : il devient possible de changer la forme même de la structure, d'en réaliser une déformation, sans néanmoins en changer la topologie, c'est-à-dire la manière dont les éléments sont connectés entre eux. En dernier lieu et *a contrario* des deux méthodes précédentes, l'optimisation topologique permet d'envisager une adaptation réelle de la géométrie aux contraintes. De par le paramétrage du problème, s'appuyant sur un très grand nombre de degrés de liberté, il est possible de créer ou de supprimer de la matière, c'est-à-dire de modifier la connectivité même des éléments entre eux.

Dans le but d'illustrer ces différentes catégories d'optimisation, la figure 1.1 présente ces trois types d'optimisation dans leur état initial (colonne de gauche) et dans leur état final (colonne de droite), celui-ci étant complètement fictif pour la nécessité de la présentation. Le problème abordé dans les trois cas repose sur les mêmes configurations physiques et géométriques : un fluide s'écoule dans un domaine carré entre deux murs adiabatiques, les profils de vitesses d'entrée u_i et de sortie u_o étant paraboliques. L'entrée fluide s'effectue à une température constante T_i et la sortie fluide est caractérisée par un gradient de température nul ($\partial T / \partial x = 0$). Un matériau générant un flux de chaleur pariétal fixe est disposé au sein de l'écoulement, transférant en régime stationnaire l'ensemble de la puissance qu'il produit au fluide. Le but pour le concepteur est de déterminer la meilleure organisation du matériau générant de la chaleur de sorte à satisfaire deux objectifs :

- minimiser la dissipation totale au sein du fluide, c'est-à-dire la perte de charge aux extrémités du domaine. Technologiquement, ce critère revient à minimiser la puissance nécessaire à la mise en mouvement du fluide, qui est directement imputable au coût de fonctionnement du système ;
- maximiser la température de sortie moyenne, pondérée par la vitesse locale, c'est-à-dire maximiser l'énergie thermique transférée dans l'ensemble du système.

Qualitativement, la satisfaction d'une fonction objectif ne peut s'effectuer qu'au détriment de l'autre. En effet, l'augmentation de la surface d'échange, dans le but d'accroître le transfert thermique du solide au fluide, entraîne inéluctablement une augmentation de la dissipation visqueuse le long de l'interface fluide/solide, qui a pour conséquence d'accroître la perte de charge.

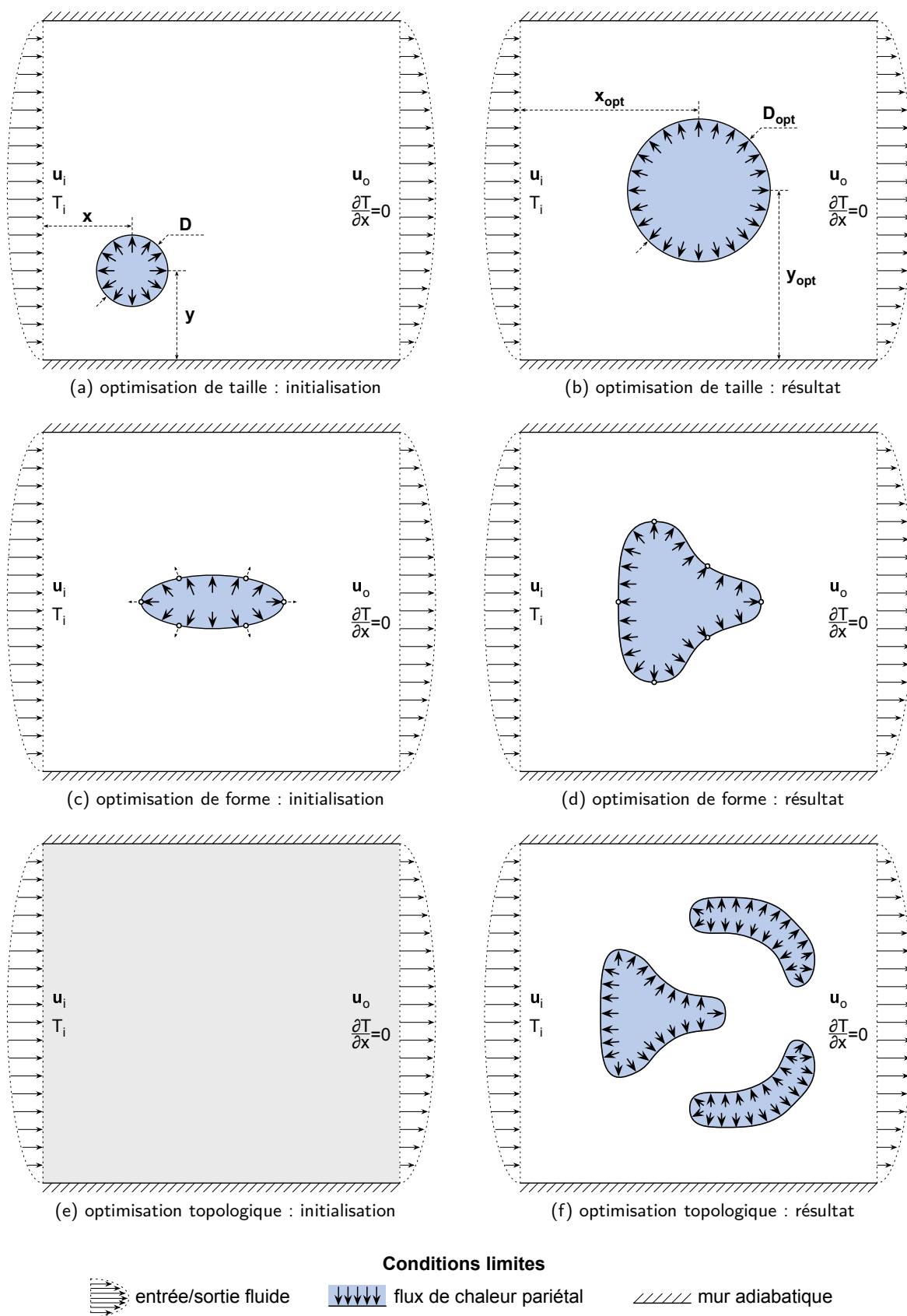


FIGURE 1.1 – Illustration de trois types de paramétrages différents utilisés par le processus d'optimisation, de la structure initiale au résultat.

Chaque ligne de la figure 1.1 illustre un type de paramétrage différent reposant sur une configuration initiale arbitraire. Indépendamment de la nature de l'algorithme d'optimisation invoqué, chaque cas permet d'appréhender les avantages et les limitations inhérentes de chaque méthode, dont les caractéristiques sont les suivantes.

- **Optimisation de taille.** Cette configuration est représentée figures 1.1a et 1.1b et suppose que les éléments constituant la géométrie optimale sont connus, mais pas leur disposition. La structure initiale est donc composée aléatoirement à partir de ces éléments : ici, la sous-figure (a) présuppose que la géométrie optimale générant un flux de chaleur pariétal est composée d'un disque, dont la position est déterminée par les coordonnées de son centre (x, y) et son diamètre D . Le processus d'optimisation a pour rôle de déterminer le triplet de valeurs optimal de ces paramètres, qui pourrait permettre d'aboutir à une structure telle que celle représentée figure (b).
- **Optimisation de forme.** Ce type de paramétrage est mis en exergue figures 1.1c et 1.1d et permet, à partir d'une structure initiale donnée, de déformer sa frontière pour la faire évoluer vers un optimal. En général, cette déformation s'effectue par le biais de points particuliers qui définissent des B-splines, assurant que la frontière reste continue, sans présenter d'arêtes particulières. Sur la figure (c), la structure initiale est une ellipse dont la frontière est conditionnée par six points de contrôle pouvant évoluer au sein du domaine de calcul et la figure (d) indique une possible répartition optimale de ces points, générant un domaine dont la frontière n'est pas descriptible à partir de géométries élémentaires.
- **Optimisation topologique.** Les deux figures 1.1e et 1.1f illustrent le concept de l'optimisation topologique dont le paramétrage permet d'agencer la matière en repensant sa connectivité. Ainsi, à partir d'un domaine initial vide, plein ou dans un état intermédiaire quelconque, les paramètres de contrôle utilisés permettent de créer des *trous* ou des *agglomérats* de matériau, sans limitation portant sur la connectivité des sous-ensembles constitués. Le résultat de ce type de paramétrage pourrait être celui figurant figure (f), où l'ensemble générant le flux pariétal est scindé en plusieurs sous-domaines, disposés en quinconce par rapport à la direction de l'écoulement.

Chaque paramétrage développe des capacités le rendant plus ou moins adéquat à traiter certaines problématiques, dépendant du contexte de l'optimisation. Ainsi, bien que l'approche topologique semble plus encline à développer des solutions réellement optimales du fait de son nombre élevé de degrés de liberté, rien ne garantit que les structures optimisées soient techniquement réalisables. *A contrario*, l'optimisation de taille fournit des solutions initialement trop contraintes et donc susceptibles d'être éloignées de leur optimum mathématique, mais qui sont technologiquement réalistes puisqu'initialement définies comme telles. D'un point de vue de l'ingénierie, le processus de dimensionnement idéal devrait s'inspirer des deux méthodes, en s'appuyant à la fois sur l'optimisation topologique pour le caractère novateur des formes qu'elles engendrent, puis sur l'optimisation de taille ou de forme pour affiner les résultats en fonction de contraintes plus pragmatiques.

1.2.2 Classification des algorithmes

La seconde classification possible des méthodes d'optimisation repose non pas sur leur objet, c'est-à-dire leur paramétrage, mais sur leur nature, et plus particulièrement celle de l'algorithme d'optimisation numérique, conduisant à leur structure optimale. Celui-ci opère en général par le biais de boucles itératives, qui modifient successivement la valeur des paramètres jusqu'à ce que la solution satisfasse à certains critères de stabilité, d'une itération à l'autre. D'un certain point de vue, les progrès effectués dans l'optimisation de la structure reposent toujours sur une méthode effectuant des essais et des erreurs successifs, la vitesse de convergence de la solution pouvant être améliorée si les essais sont construits intelligemment.

Une méthode d'optimisation n'a de sens que dans le cadre d'une fonction objectif à minimiser ou à maximiser, la performance de la structure à chaque itération étant mesurée par sa valeur. Néanmoins, cela ne signifie pas pour autant que l'algorithme d'optimisation s'appuie sur la fonction objectif pour construire une nouvelle solution plus performante, celle-ci pouvant résulter d'opérations étrangères à cette grandeur. Dès lors, une nouvelle possibilité de classement des algorithmes se dessine, dépendant de leur façon d'utiliser les informations à leur disposition pour établir la structure à l'itération suivante [3]. Dans le cadre de l'optimisation structurelle, trois méthodes se distinguent particulièrement, selon que la solution évolue par l'un des paramètres suivants.

- **Critère local.** La solution progresse en s'appuyant sur un critère local pertinent que la structure cherche à encourager ou décourager en déformant la structure dans son voisinage. Par exemple, dans le cadre du problème présenté dans la section précédente, un critère local pertinent concernant la puissance dissipée par le fluide pourrait être la contrainte pariétale. Néanmoins, il faut mentionner que ce type d'algorithme est difficilement généralisable : son fonctionnement est intimement lié à la bonne adéquation physique entre la fonction objectif et le critère local, un changement de l'un entraînant irrémédiablement un changement de l'autre.
- **Fonction objectif.** La nouvelle structure est construite en s'appuyant sur les informations liées à la fonction objectif, qui permet de quantifier la performance de l'état intermédiaire de la solution. La transmission de l'information en vue de guider la création de la nouvelle structure peut s'effectuer de manière implicite ou explicite :
 - les méthodes telles que les surfaces de réponses ou le Kriging s'appuient explicitement sur la fonction objectif pour établir un modèle de ses relations avec les variables de contrôle, dans l'optique d'en déterminer leurs valeurs optimales ;
 - les méthodes métaheuristiques à population, telles que les algorithmes génétiques [4], ou à recherche locale [5], se basent sur une suite de structures qui évoluent au fil des itérations (ou des générations) en y sélectionnant les meilleurs éléments sur la base de leur performance au sens de la fonction objectif. Dès lors, sans être explicitement guidées par sa valeur, la ou les nouvelles structures reposent implicitement sur l'historique des choix, la fonction objectif définissant en quelque sorte un opérateur de comparaison entre les solutions.
- **Dérivée de la fonction objectif.** La solution progresse vers son optimum en s'aidant de la dérivée de la fonction objectif par rapport aux paramètres de design de la structure. En d'autres termes, la sensibilité à chaque variable de contrôle est établie dans la lignée du problème direct [6] et permet de déterminer le sens de variation adéquate des paramètres impactant au mieux la fonction objectif. La nouvelle structure est donc explicitement construite sur la base mathématique d'une amélioration de la fonction objectif. Les méthodes d'optimisation numérique dites classiques se basent essentiellement sur l'information du gradient pour guider le processus de convergence. Elles distinguent des classes de problème différentes auxquelles s'appliquent des algorithmes dont les capacités à converger ont été démontrées [7–9] : optimisation linéaire, quadratique, convexe, non-linéaire...

Les deux dernières catégories sont souvent définies en opposition l'une par rapport à l'autre et sont respectivement appelées optimisation sans ou avec gradient.

Chacune des méthodes présentées possède des caractéristiques de mise en œuvre et des propriétés les rendant plus ou moins attrayante. Par exemple, les algorithmes s'appuyant sur un critère local sont particulièrement rapides en termes de calcul et concis à implémenter, mais sont rarement capables d'approcher une configuration optimale, au sens mathématique du terme. *A contrario*, les méthodes basées sur une fonction objectif, ou sa dérivée, fournissent d'excellents résultats, mais sont beaucoup plus coûteuses en termes de calcul : les méthodes métaheuristiques requièrent un nombre important

de structures pour converger, tandis que les méthodes à gradient entraînent un surcoût de calcul important à chaque itération pour évaluer la sensibilité de la fonction objectif. Peu de règles théoriques ou empiriques permettent de sélectionner l'algorithme adapté au problème traité, le choix s'effectuant souvent par défaut devant l'incapacité à utiliser une méthode : impossibilité d'obtenir le gradient, coût de calcul prohibitif, etc.

1.2.3 Revue bibliographique

La revue bibliographique présentée regroupe les travaux de la communauté scientifique sur la base des deux critères proposés précédemment, dans le contexte des transferts de masse et de chaleur. A ce stade, aucune considération n'est donnée à l'objet du processus d'optimisation : il ne s'agit pas de savoir si les structures maximisent la conduction du flux thermique ou minimisent la dissipation visqueuse au sein d'un fluide, mais de mettre en lumière les différences méthodologiques dans les processus d'optimisation. La finalité de celui-ci, c'est-à-dire la configuration physique à optimiser dans le cadre d'une fonction objectif donnée, est un critère trop versatile pour établir une vision unifiée des recherches actuelles en matière d'optimisation des transferts thermiques.

La tableau 1.1 regroupe les différents articles de la littérature portant sur l'optimisation d'écoulement interne, dans le contexte des transferts de masse et de chaleur. La présente revue bibliographique ne fait pas état de l'optimisation de structure à visée aéronautique ou aérodynamique (écoulements externes), domaine principalement constitué d'études portant sur l'optimisation de forme à l'aide d'algorithmes à gradient [10] ou metaheuristiques [11]. Le nombre d'études s'y rapportant altère une vision plus large des méthodes d'optimisation pour des configurations technologiques et industrielles, qui traitent principalement d'écoulements internes sujets à des fonctions objectif variées. Il faut également noter que la tableau 1.1 classifiant les articles selon les 3×3 critères introduits dans la section précédente, les catégorise en suivant le thème dominant abordé, notamment dans le cadre d'études comparant les différentes méthodes.

| optimisation | critère algorithmique | | | | | | total |
|--------------|-----------------------|-----|-------------------|-----|----------|-----------|-----------|
| | critère local | | fonction objectif | | gradient | | |
| | réf. | nb. | réf. | nb. | réf. | nb. | |
| de taille | - | 0 | [12–23] | 12 | [24–26] | 3 | 15 |
| de forme | - | 0 | [27–36] | 10 | [37–44] | 8 | 18 |
| topologique | [45–52] | 8 | [53–55] | 3 | [56–81] | 26 | 37 |
| total | 8 | | 25 | | 37 | | 70 |

TABLEAU 1.1 – Classification des principales publications portant sur l'optimisation des transferts de masse et de chaleur, en fonction du paramétrage adopté et du critère algorithmique.

Bien que ne pouvant se prétendre exhaustive, la classification proposée dans la tableau 1.1 affiche les deux grandes tendances des recherches menées en termes d'optimisation de structure dans le cadre de l'optimisation des écoulements internes et des transferts de chaleur, qui sont :

- l'optimisation topologique s'appuyant sur des méthodes à gradient, comptabilise plus d'un tiers des articles publiés. La grande souplesse de son paramétrage et la possibilité d'atteindre des solutions sans avoir à effectuer une définition *a priori* de la structure initiale explique en

grande partie son attrait pour la communauté scientifique. En mécanique des fluides, l'idée fondamentale de la méthode a été développée par Borrvall et Petersson en 2003 [56] ;

- l'optimisation de taille et de forme, s'appuyant sur la fonction objectif pour guider la convergence de la structure représente également un tiers des publications. La motivation principale de ces études est d'effectuer l'optimisation de configurations réalistes en s'exemptant de la délicate évaluation des dérivées. A l'exception de quelques articles, la majorité de ces travaux reposent sur des méthodes évolutionnistes et principalement les algorithmes génétiques comme souligné par Gosselin *et al.* [82].

Il faut également noter l'intérêt des chercheurs pour des critères locaux capables d'assurer, dans leur voisinage, une transformation de la structure. De tels algorithmes se prévalent d'excellentes performances en termes de vitesse de calcul et permettent d'aborder des géométries complexes. Par ailleurs, le tableau 1.1 souligne également que les méthodes se basant uniquement sur la fonction objectif, telles que les algorithmes génétiques, sont très peu utilisées dans le cadre de l'optimisation topologique qui requiert en général un nombre très important de variables de contrôle. De fait, une approche métaheuristique sur ce type de paramétrage implique un nombre rédhibitoire d'itérations pour converger, les études [53–55] s'appuyant sur une résolution assez sommaire des structures dans le but de contourner ce problème.

La catégorisation et les articles présentés ici ne font pas mention de la théorie constructale, véritable paradigme qui depuis sa publication par Bejan en 1997 [83] a été le sujet de nombreuses études conceptuelles [84–92]. La loi constructale stipule que [93] :

« Pour qu'un système fini puisse persister dans le temps, il doit évoluer de manière à offrir un accès facilité aux flux qui le traversent. »

Elle envisage principalement d'expliquer de façon déterministe nombres de structures multi-échelles, notamment d'inspirations naturelles. En terme d'ingénierie, l'approche constructale appliquée au refroidissement d'un volume fini générant de la chaleur permet d'établir une structure arborescente de haute conductivité, visant à offrir un accès facilité aux flux thermiques, c'est-à-dire à réduire la résistance thermique de l'ensemble du système. Bien que l'approche constructale ne fasse pas explicitement référence à des notions d'optimisation, telles que les minima ou les maxima, le but qu'elle poursuit s'en rapproche puisque le fil conducteur de la démarche est fondé sur une minimisation constante de la résistance aux flux pour chaque nouvelle échelle. En utilisant la terminologie de l'optimisation numérique, le processus constructal pourrait être décrit comme l'alternance continue de deux étapes : une optimisation de taille au sens strict du terme, suivie d'une connexion topologique arbitraire.

La structuration de la thèse, qui ambitionne en partie d'examiner successivement différentes méthodes autour d'un même exemple, se prête mal à prolonger l'analyse bibliographique sous l'angle des problématiques abordées par les processus d'optimisation. En revanche, chaque chapitre débute par une contextualisation du procédé examiné et comprend un aperçu des problèmes réels qu'il a permis d'étudier.

1.3 Méthodologie

En s'appuyant sur les différentes classifications proposées précédemment, cette partie s'attache à positionner les travaux de thèse qui concernent l'optimisation de structures assurant des transferts de masse et de chaleur. Ils se rapportent exclusivement à l'optimisation au sens topologique, du fait de sa capacité à générer des solutions ne reposant sur aucune hypothèse structurelle préalable. De plus, celle-ci présente un caractère plus universel que les autres types d'optimisation lorsqu'elle

est convenablement paramétrée, permettant d'aborder des configurations radicalement différentes sans effort de développement supplémentaire. La méthodologie adoptée est organisée en deux parties distinctes :

- **Optimisation des transferts conductifs.** L'évacuation optimale d'un flux de chaleur est utilisée comme problème de référence pour tester différentes stratégies d'optimisation, telles que la théorie constructale, les automates cellulaires et une approche par une méthode d'homogénéisation ;
- **Optimisation des transferts conducto-convectifs.** Le point précédent permet d'arrêter la stratégie présentant le plus de potentiel dans le cadre de la diffusion d'un flux de chaleur. Celle-ci est ensuite mise en œuvre dans le contexte de l'optimisation de son transport, en prenant en compte les problématiques spécifiques liées à l'écoulement fluide.

1.3.1 Résolution des équations aux dérivées partielles

Quelle que soit la méthode d'optimisation envisagée, son pré-requis repose sur la résolution d'une ou plusieurs équations aux dérivées partielles régissant le ou les phénomènes physiques considérés : équation de la chaleur, équation de Navier-Stokes, équation de l'énergie. Etant donné que les géométries sujettes au processus d'optimisation ne sont pas triviales, ce qui exclut leur résolution analytique, il convient d'envisager une méthode numérique s'appuyant sur une discrétisation des structures. Parmi les différents outils présents dans la littérature, trois méthodes se distinguent particulièrement : les différences finies [94], les volumes finis [95, 96] ou les éléments finis [97]. La méthode des différences finies utilise une approximation des dérivées partielles, tandis que les volumes et éléments finis se fondent à l'inverse sur une approximation des intégrales, notamment grâce au théorème de Green-Ostrogradski dans le cas des volumes finis. La différence entre les schémas en volumes finis et en éléments finis peut également être vue en terme de formulation *forte* ou de formulation *faible*, cette dernière étant également connue sous le nom de formulation variationnelle.

La méthode choisie dans le cadre de la thèse est celle des volumes finis pour deux raisons en particulier. En premier lieu, la finalité des travaux de recherche est d'établir une méthodologie capable d'aborder l'optimisation de transferts de masse et de chaleur, impliquant nécessairement la résolution d'un écoulement fluide. Dans ce contexte, les bases académiques de la méthode des volumes finis sont déjà bien posées et tirent avantage de sa propriété intrinsèque de conservation des flux [95, 96]. Il faut noter que l'avantage de la formulation variationnelle propre aux éléments finis est de disposer des résultats théoriques de l'analyse fonctionnelle, permettant de prouver l'optimalité des convergences. L'objet du présent travail de recherche ne visant pas à établir ce type de preuve, la méthode des volumes finis semble mieux adaptée, notamment parce qu'elle permet une compréhension physique plus poussée du traitement mathématique du couplage pression-vitesse.

Le second point préconisant l'utilisation de la méthode des volumes finis est d'ordre plus pragmatique. Un des buts également poursuivi par cette thèse vise au développement d'un outil numérique permettant l'optimisation topologique de configurations industrielles. Or, le monde de l'industrie est rompu à l'utilisation des volumes finis, notamment par les nombreux codes de calculs commerciaux s'appuyant sur cette méthode. Concevoir un outil d'optimisation topologique dans le contexte de la mécanique des fluides numérique semble inévitablement devoir s'appuyer sur les volumes finis, afin d'assurer une certaine forme de continuité avec l'existant.

1.3.2 Optimisation des transferts de masse et de chaleur

La première partie des travaux de thèse explore successivement les méthodes d'optimisation topologique les plus représentées dans la littérature scientifique, dans un contexte purement conductif.

Le problème académique introduit par Bejan [83] dans le cadre de la théorie constructale sert de cas de référence entre les différentes approches. Cette partie vise donc à confronter les performances des différents algorithmes d'optimisation, sur la base d'un même problème commun à résoudre : comment refroidir efficacement un volume fini générant de la chaleur à l'aide d'une faible quantité de matériau hautement conducteur ? L'objectif poursuivi par cette démarche est double : investiguer unitairement chaque méthode et en proposer des améliorations ou des extensions, puis sélectionner l'algorithme le plus efficace pour aborder des problématiques conducto-convectives.

La première étape est scindée en trois chapitres explorant à tour de rôle un paradigme de l'optimisation des structures.

- Le chapitre 2 s'intéresse à la théorie constructale développée par Bejan [83], qui vise à construire un système thermique sous la forme d'un réseau en s'appuyant sur les contraintes technologiques imposées à ses plus petites échelles. A la suite de la présentation de la méthode, les études menées portent sur deux points en particulier : la clarification de certaines hypothèses physiques qui ont mené à des divergences au sein de la communauté scientifique et la détermination de l'influence de la complexité des réseaux sur les performances thermiques réelles des structures.
- Le chapitre 3 examine l'organisation d'automates cellulaires hautement conducteurs, évoluant sur la base d'un critère local, dans la lignée des travaux de Boichot *et al.* [52]. Une amélioration de l'évaluation de ce critère d'évolution est proposée, avant de considérer une approche conservant le même paramétrage mais s'appuyant sur une fonction objectif globale. Cette méthode effectue un rapprochement entre les automates cellulaires et l'Optimisation Structurale Evolutionniste (ESO), introduite en thermique par Li *et al.* [46, 50].
- Le chapitre 4 étudie l'approche dite *Solid Isotropic Material with Penalization* (SIMP) qui est fondée sur un paramétrage particulier du problème, permettant l'usage d'algorithmes d'optimisation numérique à gradient. Cette méthode, initialement portée par Gersborg-Hansen *et al.* [59] dans le cadre des volumes finis est améliorée sur deux points précis : l'introduction d'un taux de production de chaleur variable permettant d'investiguer l'influence de celui-ci sur la solution et le traitement du problème sous un angle multi-objectif. Ce dernier point met particulièrement en lumière les précautions à prendre pour être en mesure d'établir avec précision une frontière de Pareto.

La première partie de la thèse est conclue par une synthèse et une comparaison des différentes méthodes, qui soulignent les excellentes performances qualitatives et quantitatives de l'approche SIMP. Celle-ci permet également de contrôler précisément l'évolution des structures, par le biais de multiples paramètres numériques. Ces avantages, bien que contrebalancés par la complexité numérique de la méthode, ont conduit à son implémentation pour l'optimisation de structures dans lesquelles interviennent des transferts de masse, couplés des transferts de chaleur. Ces développements sont présentés dans la seconde partie de la thèse dans le cas d'écoulements laminaires et pointent un certain nombre de précautions à mettre en place dans le cadre de l'utilisation d'une méthode de pénalisation couplée à la méthode des volumes finis. Néanmoins, les résultats obtenus sont en parfaite adéquation avec ceux présentés dans la littérature scientifique concernant uniquement l'écoulement fluide et se révèlent prometteurs quant au couplage de celui-ci avec la thermique.

1.3.3 Remarques

En raison de la méthodologie adoptée dans le cadre de la thèse, le manuscrit est composé pour l'essentiel de l'investigation systématique et successive d'approches différentes. Afin de conserver la syntaxe propre à chaque approche, une nomenclature est proposée en tête de chaque chapitre et n'est applicable qu'à celui-ci. Ce choix s'inscrit dans une logique de continuité avec celui effectué à

propos de la bibliographie et mentionné section 1.2.3. Ainsi, à l'exception des conclusions qui lient les études comparativement les unes aux autres, les méthodes présentées dans chaque chapitre peuvent être abordées indépendamment et indifféremment de l'ordre classique de lecture.

Première partie

Optimisation topologique des échanges de chaleur en conduction

Chapitre 2

Théorie constructale

En premier lieu, ce chapitre introduit le problème académique servant de cas test tout au long de la partie conduction : le refroidissement efficient d'un volume fini générant de la chaleur, à l'aide d'une quantité limitée de matériau hautement conducteur. Par la suite, une analyse de la théorie constructale appliquée à ce problème spécifique est conduite, mettant en exergue les hypothèses physiques, et leurs limitations respectives, sur lesquelles l'approche s'appuie. En dernier lieu, une méthode est proposée afin d'examiner l'influence de la complexité des réseaux constructaux sur les performances thermiques, en supprimant le biais introduit par les variations de l'aire du domaine conducteur. Ces travaux ont été publiés dans *Energy Conversion and Management* sous le titre « *A new perspective of constructal networks cooling a finite-size volume generating heat* » [98] et sont reproduits ici dans leur intégralité.

2.1 Abstract

Constructal theory has been used in several scientific fields since it has been established a decade ago. It mainly treats of the "area to point" flow problem, which has been first-written in the frame of the cooling of a finite-size volume generating heat. This problem, widely discussed in literature, has been optimized thanks to constructal theory formulated by Bejan, with a deterministic approach. However, some of the physical and mathematical assumptions made to simplify the problem are questionable, especially the ones regarding the high-conductivity material constituting the tree-shaped structure. In this paper, the performances of constructal designs are evaluated using a finite volume method, which allows making a comparison between different constructal geometries. An algorithm has been developed which has the ability for restraining constructal networks inside a finite-size area, without overconstraining the structure. All things considered, this paper examines constructal theory from a new point of view thanks to analytical and numerical investigations, in the frame of a finite-size volume generating heat.

2.2 Introduction

The first physical application of constructal theory has been published by Bejan in 1997 [83]. Since this date, many theories based on the observation of organization in Nature have been developed [84, 93]. Contrarily to fractal approach which describes natural geometries from an external point of view, the constructal method aims to build optimal solutions resulting from an optimized constructing process. In other words, constructal theory looks to an explanation of natural features whereas fractal theory provides only a way to describe them.

Constructal approach has been applied to a wide range of development which make difficult to summarize its principle. Conceptually, this theory can be qualified as a deterministic method to link

Nomenclature

Dimensional numbers

| | |
|--------|--------------------------------------|
| A | area [m^2] |
| a | height of the final geometry [m] |
| E | error function |
| H, L | height and length [m] |
| k | thermal conductivity [$J/(s.m.K)$] |
| M, P | particular points |
| n_1 | number of elemental volumes in A_1 |
| q''' | heat generation rate [$J/(s.m^3)$] |
| Q | heat flux [J/s] |
| T | temperature [K] |
| x, y | coordinate [m] |

Non-dimensional numbers

| | |
|-----------|--|
| \hat{k} | thermal conductivity ratio ($= k_p/k_0$) |
| r | aspect ratio ($= H_i/L_i$) |
| R | non-dimensionalized thermal resistance |
| ϕ | porosity ($= A_{p,i}/A_i$) |

Subscripts

| | |
|--------|----------------------------|
| 0 | elemental volume |
| 1 | first construct |
| i | i^{th} construct |
| p | high-conductivity material |
| approx | approximation |
| exact | exact |
| min | minimal |
| opt | optimal |

objects and flows from micro-scales to macro-scales, taking into account different constraints. This connection is generally made in two steps [85]:

1. The geometrical characteristics of the smallest element are optimized considering its technological constraints related to the smallest scale.
2. The elementary volumes are spatially arranged so as to satisfy the criteria defined by an objective function (or multi-criteria) and to fill the whole finite-size volume.

Constructal theory has been initially developed around a specific conductive problem, aiming an optimal cooling of electronic components. The problem has been described as following in [83]:

Consider a finite-size volume in which heat is being generated at every point, and which is cooled through a small patch (heat sink) located on its boundary. A finite amount of high-conductivity (k_p) material is available. Determine the optimal distribution of k_p material through the given volume such that the highest temperature is minimized.

In other words, the optimization of the network built to drain the heat flux through the finite-size volume is tackled. In such a case, the strength of constructal theory is to propose a deterministic way to distribute k_p material inside the volume generating heat.

Since [83], many enhancements of constructal approach applied to this specific cooling problem have been developed, which can be categorized in two different parts. On one hand, it is possible to distinguish the improvements concerning the cooling tree-network shape obtained thanks to numerical methods such as [99–101] and, on the other hand, the enhancements which look deeper into the constructal methodology with an analytical point of view. The present paper deals with this second category which aims to analyze the assets and the limiting aspects of constructal theory.

Chronologically, after the publication of the first Bejan's paper, the structural improvements of constructal theory have been led through three major papers. In 2003, Ghodoossi and E grican showed the possibility to reach another optimal tree-network thanks to a constructal approach without making any assumption regarding the effective thermal conductivity of construct levels [102]. This work has been contested by Wu *et al.* in 2007 [103], showing that the difference of the final shape between [83] and [102] comes from the unsuitable expression of the effective thermal conductivity in [83], and not from the assumption made about it as concluded in [102]. At the same time,

Kuddusi and Denton [104] have analytically solved the conductive problem taking place during the first optimization step and they concluded that the slenderness assumption of the elemental volume made in [83] leads to a significant deviation.

At first, this paper aims to introduce both constructal approaches, developed in [83] and improved in [102, 103]. The study does not consider the analytical issues during the construction process, but underlines the difficulty to compare the geometries between them since both constructal approaches lead to different final finite-size volumes from the same elemental volume. The goal of the next section is to analyze the conclusion in [104] regarding the aspect-ratio optimization of the elemental volume. Then, the present work addresses the problem of the porosity calculation: a proposal is made regarding the way to evaluate it.

The last part of this study is devoted to assess the constructal shapes from another point of view, always in the case of a finite-size volume generating heat. Instead of looking into the way to construct the cooling tree-networks, these are rated thanks a numerical method applied to the same configuration. In order to avoid the difficulties underlined in section 2.3 and to compare the performances of each structure, an algorithm has been developed to constrain the tree-networks inside a volume of given area.

2.3 A comparative review of two constructal methodologies

This section aims to introduce concurrently two constructal methods and highlights the difficulties to compare both approaches. The traditional constructal process is followed and the results coming from the initial development in [83], as well as its enhancements in [102, 103], are reported at each step.

2.3.1 Optimization of the elemental volume

Constructal process starts with the optimization of the “*elemental volume*”, made up with a material of thermal conductivity k_0 , as shown in Fig. 2.1. The rectangular area $H_0 L_0$ has a constant heat generation rate per unit volume q''' . D_0 is the width of the highly conductive link constituted with k_p material. The aspect-ratio H_0/L_0 is free to vary, whereas $\phi_0 = D_0/H_0$, called the porosity, is defined as a technological constraint. Heat is conducted by the central nerve towards the heat sink M_0 through k_p material, which drains the heat produced by the elemental volume through one single point. All the other boundaries of this element are adiabatic.

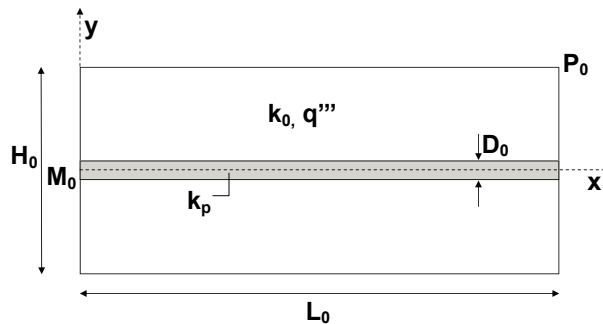


Figure 2.1: Slender elemental volume and its characteristics [83].

Two major assumptions about the temperature field inside the elemental volume are made, assuming that the rectangular area is slender enough. First, the heat flux inside the generating material is

oriented following the y -axis, leading to:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{q'''}{k_0} = 0 \quad (2.1)$$

The boundary conditions associated to this area are $\partial T / \partial y = 0$ at $y = \pm H_0/2$ and $T(x, 0) = T_p(x)$. Secondly, the heat conduction in the high-conductivity material is described by:

$$k_p D_0 \frac{\partial^2 T_p}{\partial x^2} + q''' H_0 = 0 \quad (2.2)$$

with respect to the boundary conditions which are $dT_p/dx = 0$ at $x = L_0$ and $T_0 = T(0, 0)$ at $x = 0$. Integrating Eqs. (2.1) and (2.2), the temperature field in the whole elemental volume can be approximated as:

$$T(x, y) - T(0, 0) = \frac{q'''}{2k_0} (H_0 y - y^2) + \frac{q''' H_0}{k_p D_0} \left(L_0 x - \frac{x^2}{2} \right) \quad (2.3)$$

for $y > 0$. The solution for the other half of the elemental volume is established by replacing y with $-y$ thanks to the symmetry.

The optimization process aims to minimize the difference between the hottest point, located in P_0 and the heat sink. The optimal aspect-ratio, which minimizes $\Delta T_0 = T(L_0, H_0) - T(0, 0)$ knowing that ϕ_0 and A_0 are manufacturing constants, is [83]:

$$r_{0,opt} = \left(\frac{H_0}{L_0} \right)_{opt} = 2 \left(\hat{k} \phi_0 \right)^{-1/2} \quad (2.4)$$

where $\hat{k} = k_p/k_0$ which should be > 1 . Under such conditions, the non-dimensionalized minimal temperature difference is given by:

$$R_{0,min} = \frac{\Delta T_{0,min}}{q''' H_0 L_0 / k_0} = \frac{1}{2} \left(\hat{k} \phi_0 \right)^{-1/2} \quad (2.5)$$

As so far, there is no difference between the method proposed in [83] and in [102,103]. Both of them base their constructal process on an elemental volume optimized thanks to the same methodology, leading to the same geometry. The difference occurs mainly during the next step.

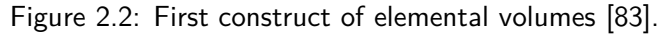
2.3.2 Optimization of the first order construct

The next constructal step aims to fill the whole area generating heat with the optimized elemental systems. A finite number of elemental volumes are assembled on every side of a new high-conductive link, forming a structure called first order construct, as shown in Fig. 2.2.

In Bejan's paper, constructal theory has initially been built by replacing each elemental volume by an effective thermal conductivity k_1 [83], assuming it behaves in the same way as the elemental volume made up of k_0 material with a conductive link of k_p material ($k_p \gg k_0$):

$$k_1 = k_p \frac{D_0}{H_0} \quad (2.6)$$

The optimization of the first construct has two degrees of freedom: the aspect-ratio of the structure H_1/L_1 , which is linked with the number $n_1/2$ of elemental systems added on each side of the new central high-conductivity path D_1 , and its width. The first parameter is assessed with the same reasoning as the one used for the elemental volume, replacing k_0 by k_1 . The width of D_1 is optimized


$$\phi_1 = \frac{A_{p,1}}{A_1} = \frac{D_1 L_1 + n_1 D_0 L_0}{L_1 H_1} \quad (2.7)$$

$$\left(\frac{D_1}{D_0}\right)_{opt} = \left(\hat{k}\phi_0\right)^{1/2} \quad (2.9)$$

$$r_{1,opt} = \left(\frac{H_1}{L_1} \right)_{opt} = \sqrt{2} \quad (2.10)$$

17

2.3.3 Optimization of the higher order constructs

The building process continues with the second construct, allowing enlarging the area covered with k_p material: the first order constructs are set along a new high-conductivity path, D_2 . In both previously mentioned approaches [83, 102], similar steps to the ones used for the optimization of the first construct are followed: optimization of the aspect-ratio H_2/L_2 , respectively n_2 , and optimization of the width of the high-conductivity link D_2 . It is worth to note that both approaches lead to the same fundamental problem: the $n_{2,opt}$ number of first constructs is not an even integer. Indeed, in [83], $n_{2,opt} = \sqrt{2}$, whereas Ghodoossi and Egrican [102] show that $n_{2,opt} = 2\sqrt{2}$. Of course, it is impossible to design a structure with a number of elemental volumes which is not an integer. Both papers ascertain that the less bad number is $n_{2,opt} = 2$ (see Table 2.1), proving that this value minimizes the non-dimensionalized maximum temperature difference. But, in both cases, this choice definitely deviates from an optimal configuration. In other words, the whole constructal structure built above the second construct rests on a non-optimal configuration.

| Level | $n_{i,opt}$ | | $r_{i,opt} = \left(\frac{H_i}{L_i}\right)_{opt}$ | | $\left(\frac{D_i}{D_{i-1}}\right)_{opt}$ | | $\frac{\Delta T_{i,min}}{q''' H_0^2/k_0}$ | |
|-------|------------------------|-------------------------|--|-----------------------|--|-------------------------------|---|--------------|
| Ref. | [83] | [102] | [83] | [102] | [83] | [102] | [83] | [102] |
| 0 | - | - | $2/\sqrt{\hat{k}\phi_0}$ (Eq. 2.4) | - | - | - | 0.250 | - |
| 1 | $\sqrt{\hat{k}\phi_0}$ | $\sqrt{2\hat{k}\phi_0}$ | 2 (Eq. 2.8) | $\sqrt{2}$ (Eq. 2.10) | $\sqrt{\hat{k}\phi_0}$ (Eqs. 2.9 & 2.11) | - | 0.375 | 0.500 |
| 2 | 2 | 2 | 1 | $\sqrt{2}$ | $4/\sqrt{3}$ | $2\sqrt{2}$ | 0.592 | 0.750 |
| 3 | 2 | 2 | 2 | $\sqrt{2}$ | 2 | 2 | 0.808 | 1.104 |
| 4 | 2 | 2 | 1 | $\sqrt{2}$ | 2 | 2 | 1.241 | 1.604 |

Table 2.1: Comparison of constructal approaches in [83] and [102] - *The bold numbers highlight the differences between both methods.*

The constructal process goes on with higher order constructs, following the same optimization method at each step: third, fourth, fifth construct and so on. Table 2.1 compares the main characteristics of the first four assembly levels for both approaches. Note that the lengths L_i characterize the actual lengths of the finite-size volume, and not the lengths of the conductive paths as in [83].

The method developed in [102] has serious arguments to be considered more optimal, especially because it does not take any assumption regarding the effective conductivity of the first construct. However, a quantitative comparison between both constructions is structurally difficult to make: even if the non-dimensionalized temperature difference seems higher in [102] (see Table 2.1), the area of each finite-size volume at equivalent constructal level is not the same, as shown in Fig. 2.3.

This difficulty has been the main reason to look for a non-dimensionalized criteria able to rate the structure between them, irrespective of their area. Among all the existing criterion, one of the most popular is the thermal resistance [89], derived as:

$$R_{i,min} = \frac{\Delta T_{i,min}}{q''' A_i/k_0} \quad (2.12)$$

where A_i is the area of the i^{th} construct. Ghodoossi and Egrican show in their approach [102], that transition between elemental and first construct decreases the thermal resistance if $\hat{k}\phi > 8$, considering that the same amount of high-conductivity material is available for both constructs. The

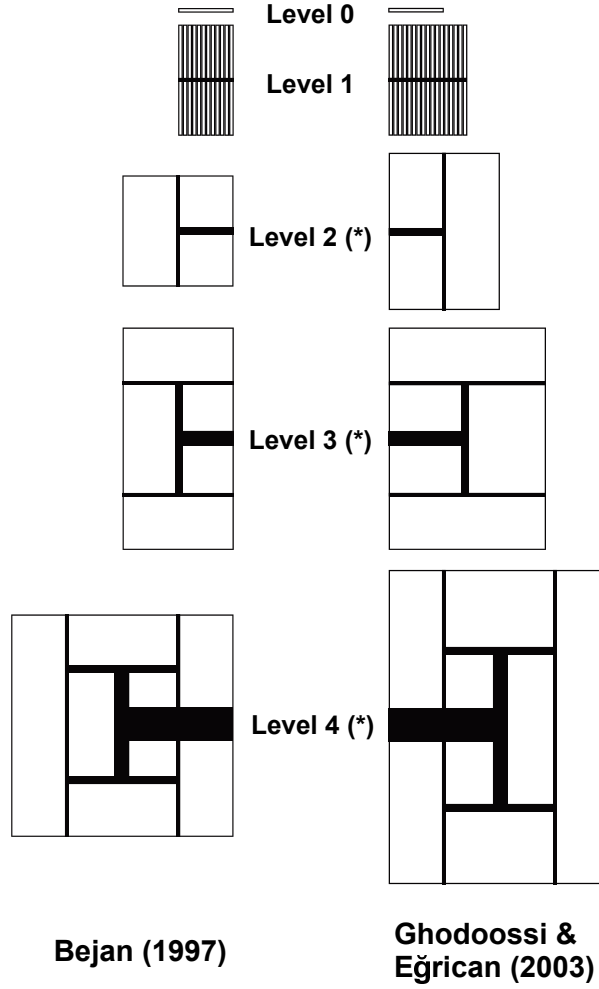


Figure 2.3: Geometrical comparison between Bejan [83] and Ghodoossi & Egrican [102] approaches for the first four construct levels - (*) The elemental volumes (level 0) are not depicted on these assembly levels.

author underlined an important point in their conclusion: under such conditions, the second and higher order constructs will not improve the efficiency reached by the first construct. Ghodoossi also achieved the same conclusions with a criteria based on the entropy generation rate [105].

2.4 Analytical perspectives

The purpose of this section is to underline two aspects which seem fundamental in the constructal process. On one hand, the problem of the heat generation through k_p material is tackled, in the eyes of the previous works. On the other hand, a fundamental issue regarding the porosity calculation is addressed and quantified.

2.4.1 High-conductivity material and heat generation

Bejan [83], as well as Ghodoossi and Egrican [102], have taken the same assumption to optimize the elemental volume: they assume that the conduction problem in the central link (D_0) is governed by the fin equation (see Fig. 2.1 and Eq. (2.2)). If this assumption can be made when $D_0 \ll H_0$, it is worth to note that it masks another fundamental physical hypothesis regarding the heat generation through k_p material. Indeed, with a realistic point of view, it stands to reason that the highly

conductive material (k_p) does not generate any heat, knowing that it is added to the structure in order to cool it.

In this subsection, the classical constructal approach is applied to the elemental volume in order to optimize it, but taking clearly into account that the k_p material does not generate heat. As detailed in section 2.3.1, the same slenderness assumption is made ($H_0 \ll L_0$): the conduction through the k_0 material follows the y -axis, whereas it is oriented in the x direction through the k_p material. The equation for steady conduction (see Eq. (2.1)) does not change, because it still describes the same problem. But from now on, the second boundary condition includes the width of D_0 link, as no heat generation rate participates in k_p material.

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{q'''}{k_0} = 0 \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=\pm H_0/2} = 0 \quad (2.14)$$

$$T\left(x, \pm \frac{D_0}{2}\right) = T_0(x) \quad (2.15)$$

Integrating these equations on the k_0 area provides:

$$T(x, y) = \frac{q'''}{2k_0} \left[H_0 \left(y - \frac{D_0}{2} \right) + \frac{D_0^2}{4} - y^2 \right] + T_0(x) \quad (2.16)$$

Then, instead of applying the fin equation to the central nerve (Eq. (2.2)), the energy balance equation is written for a differential element belonging to the k_p link, as shown in Fig. 2.4:

$$2Q_0 + Q_{p,1} + Q_{p,2} = 0 \quad (2.17)$$

where $2Q_0$ is the energy quantity coming from the heat generation rate taking place into the k_0 material and reaching the k_p path on its upper and lower sides. It can be derived as:

$$Q_0 = q''' \frac{H_0 - D_0}{2} dx \quad (2.18)$$

The heat flow is restricted to conduction as described by Fourier's law of heat conduction. The $Q_{p,1}$ and $Q_{p,2}$ heats can be derived as:

$$Q_{p,1} = -k_p D_0 \frac{\partial T_0}{\partial x} \Big|_x \quad (2.19)$$

$$Q_{p,2} = k_p D_0 \frac{\partial T_0}{\partial x} \Big|_{x+dx} \quad (2.20)$$

Substituting Eq. (2.18), Eq. (2.19) and Eq. (2.20) into Eq. (2.17) and evaluating the result leads to:

$$q''' (H_0 - D_0) + k_p D_0 \frac{1}{dx} \left(\frac{\partial T_0}{\partial x} \Big|_{x+dx} - \frac{\partial T_0}{\partial x} \Big|_x \right) = 0 \quad (2.21)$$

which can also be written as:

$$k_p D_0 \frac{\partial^2 T_0}{\partial x^2} + q''' (H_0 - D_0) = 0 \quad (2.22)$$

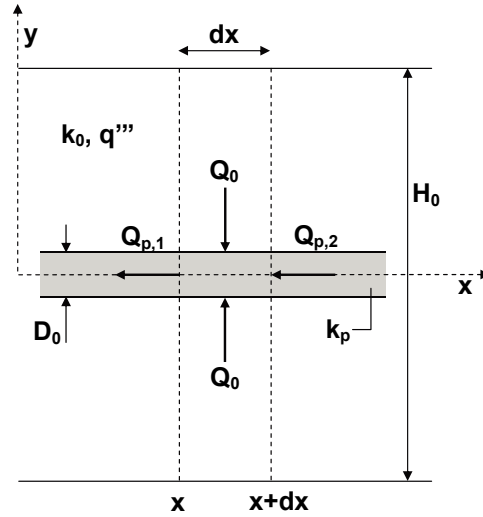


Figure 2.4: Heat transfer balance in a differential element of the the high-conductivity path.

A comparison between Eq. (2.22) and the original Eq. (2.2) shows that they differ from a term being equal to $q'''D_0$. Physically, it means *a posteriori* that a heat generation rate was implicitly assumed for k_p material in the former approach. In other words, the initial optimization of the elemental system made by Bejan [83], and later by Ghodoossi and Egrican [102] inferred that a heat generation rate is taking into account through the k_p material. Furthermore, the constructal process leans on the optimization of the elemental volume, transposing this assumption to the higher constructs. As a consequence, the final geometry has been optimized as if the k_p material as a whole was subjected to a heat generation rate.

Solving Eq. (2.22) with the same boundary conditions as reported previously for Eq. (2.2) gives:

$$T_0(x) = q''' \frac{H_0 - D_0}{k_p D_0} \left(L_0 x - \frac{x^2}{2} \right) + T(0, 0) \quad (2.23)$$

Integrating Eq. (2.23) into Eq. (2.16):

$$T(x, y) - T(0, 0) = \frac{q'''}{2k_0} \left[H_0 \left(y - \frac{D_0}{2} \right) + \frac{D_0^2}{4} - y^2 \right] + q''' \frac{H_0 - D_0}{k_p D_0} \left(L_0 x - \frac{x^2}{2} \right) \quad (2.24)$$

which is valid for $y > 0$. The maximum temperature still occurs at the farthest corner from the heat sink $T(L_0, H_0/2)$. In such conditions, the non-dimensionalized thermal resistance can be written as:

$$R_0 = \frac{T(L_0, H_0/2) - T(0, 0)}{q''' H_0 L_0 / k_0} = \frac{H_0}{8L_0} - \frac{D_0}{4L_0} + \frac{D_0^2}{8H_0 L_0} + \frac{k_0}{2k_p} \left(\frac{L_0}{D_0} - \frac{L_0}{H_0} \right) \quad (2.25)$$

Introducing the ratios which define the technological constraints, i.e. $\phi_0 = D_0/H_0$ and $\hat{k} = k_p/k_0$, as well as the aspect-ratio $r = H_0/L_0$ which is the optimization parameter, leads to:

$$R_0 = (\phi_0 - 1) \left[\frac{1}{8} r (\phi_0 - 1) - \frac{1}{2\hat{k}\phi_0 r} \right] \quad (2.26)$$

This equation shows that R_0 can be minimized with respect to r . The optimization results are:

$$r_{opt} = \left(\frac{H_0}{L_0} \right)_{opt} = 2 \left(\frac{1}{\hat{k}\phi_0(1 - \phi_0)} \right)^{1/2} \quad (2.27)$$

$$R_{0,min} = \frac{1}{2} \frac{(1 - \phi_0)^2}{\sqrt{\hat{k}\phi_0(1 - \phi_0)}} \quad (2.28)$$

The temperature along the x -axis is known thanks to Eq. (2.24), but evaluated at $y = D_0/2$. A look at the equipartition principle provides the same result as [83]:

$$T(L_0, D_0/2) - T(0, D_0/2) = T(L_0, H_0/2) - T(L_0, D_0/2) = \frac{1}{2} \Delta T_{0,min} \quad (2.29)$$

In other words, the temperature drop through the k_0 material equals the one through the k_p material, as proved by Bejan. However, the minimal temperature difference can be seen by combining Eq. (2.27) and Eq. (2.28):

$$\Delta T_{0,min} = \frac{q'''(H_0 - D_0)^2}{4k_0} \quad (2.30)$$

It means that the minimal temperature difference decreases as $(H_0 - D_0)^2$, whereas [83] showed that $\Delta T_{0,min} \sim H_0^2$. This differential comes from the absence of heat generation rate through the k_p material.

Kuddusi and Denton [104] have analytically solved the temperature field for an elemental volume without heat generation through k_p and without considering a slenderness assumption to simplify it. Their study provides reference values to compare the assumptions made in the different approaches to their exact result. One of their conclusions underlines that the slenderness assumption does not lead to a significant deviation of the optimal aspect-ratio optimized in [83, 102], especially for low values of conductance $\hat{k}\phi_0$. On the contrary, the minimal thermal resistance $R_{0,min}$ calculated in [83, 102] is widely overestimated in comparison with the exact value. They show that accurate correlations describing the behavior of the optimal aspect-ratio and the minimized thermal resistance in function of \hat{k} and ϕ_0 can be determined. For example, for $\hat{k} = 400$, they proved that:

$$r_{opt} = \left(\frac{H_0}{L_0} \right)_{opt} = 1.5443 (\hat{k}\phi_0)^{-0.4060} \quad (2.31)$$

$$R_{0,min} = -0.0355 \ln (\hat{k}\phi_0) + 0.1946 \quad (2.32)$$

Fig. 2.5 shows the correlations between [83, 102], [104] and the present work for r_{opt} and $R_{0,min}$ values. This comparison is made at $\hat{k} = 400$ and the optimal aspect-ratio, as well as the minimal thermal resistance, are plotted versus the conductance $\hat{k}\phi_0$.

Regarding this study, the main divergence between the exact approach [104] and the present work takes place at low values of conductance and only for the minimal thermal resistance. This absence of correlation makes sense, since the slenderness assumption is not valid for low conductance values: as a matter of fact, the optimal aspect-ratio is above 0.35 for these low conductance values, which seems to be the highest value to consider the elemental volume as slender. This remark leans on the thermal resistance and its increasing deviation from the exact value beyond $r_{opt} = 0.35$. The values of r_{opt} and $R_{0,min}$ which are not valid are hatched on both graphs.

As so far, the results show that the slenderness assumption is valid in the frame of an elemental volume without heat generation rate through k_p . Indeed, the slenderness assumption provides accurate results for r_{opt} and $R_{0,min}$ if $r_{opt} \leq 0.35$, as shown in this section. Moreover, a comparison between the results coming from [83] and [104] cannot be made since these studies do not tackle the problem of cooling a finite-size volume with the same physical assumption: the presence, or not, of heat generation through k_p material.

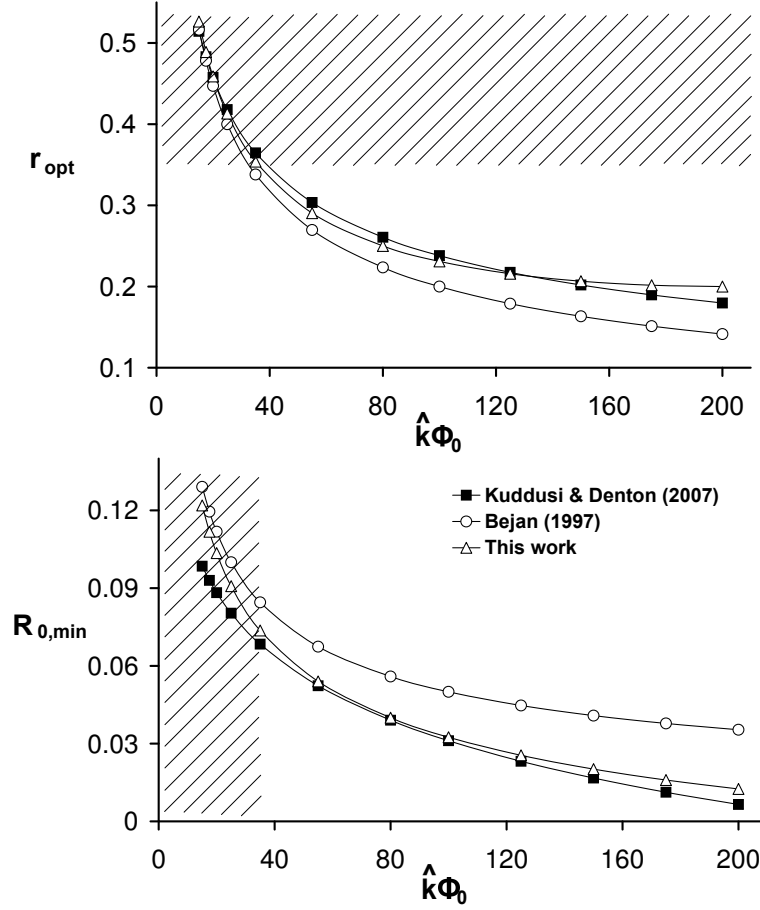


Figure 2.5: Comparison of r_{opt} and $R_{0,min}$ between this work, Kuddusi & Denton [104] and Bejan [83] approaches for $\hat{k} = 400$.

2.4.2 Fraction of high-conductivity material

The fraction ϕ of high-conductivity material is a fundamental parameter of constructal theory. During the constructal process, the non-dimensionalized thermal resistance is minimized subject to it. Furthermore, the porosity is essential to make a comparison between the different structures: higher is ϕ , lower is the thermal resistance. So, to compare efficiently the constructal shape, it is necessary to know accurately the quantity of k_p material included in the final volume. Bejan [83], Ghodoossi and Egrican [102], Kuddusi and Denton [104], as well as Chen *et al.* [106], calculate this ratio with the same method: they add the k_p quantity of the previous assembly level to the quantity added by the new path of the current level. The reasoning below has been instanced thanks to the original constructal methodology coming from [83], but could also be led with other variants, such as [102] or [104].

The total area of the i^{th} construct is well-known as the product of the height H_i and the length L_i . In Bejan's approach, L_i is the length of the highly conductive link, which is half of the total length, except for the elemental and first construct (see Fig. 2.3).

$$\begin{cases} A_i = H_i L_i & i < 2 \\ A_i = 2H_i L_i & i \geq 2 \end{cases} \quad (2.33)$$

Eq. (2.34) gives by recurrence the k_p area in function of the assembly level i , in the frame of the classical solution:

$$\begin{cases} A_{p,0} = D_0 H_0 \\ A_{p,1} = n_1 A_{p,0} + D_1 L_1 \\ \text{for } i \geq 2: \\ A_{p,i} = 2A_{p,i-1} + D_i L_i \end{cases} \quad (2.34)$$

ϕ_i is evaluated from Eq. (2.33) and Eq. (2.34), as:

$$\phi_i = \frac{A_{p,i}}{A_i} \quad (2.35)$$

However, this calculation is imprecise after the first construct, because it does not include the width of each k_p path in the reasoning, similarly to section 2.4.1. Indeed, at each scale change, the k_p links recover one other and each crossing area is counted twice instead of once, overestimating the real value of the porosity ϕ . The deep gray areas of Fig. 2.6 show the intersections between:

- A. the elemental volume and the first construct;
- B. the last k_p link and the next to last;
- C. the last k_p link and the elemental volume;
- D. the last k_p link and the first order construct.

Aiming a more accurate evaluation of the porosity, it is necessary to redefine the A_p function evaluating the total area covered with the k_p material, from now on called A'_p . Eq. (2.36) calculates by recurrence this area subtracting the superposed elements in order to count them only once. The laws vary in function of the assembly level (odd or even), as proposed by constructal theory in [83].

$$\begin{cases} A'_{p,0} = D_0 H_0 \\ A'_{p,1} = n_1 A_{p,0} + D_1 \left(L_1 - \frac{n_1}{2} D_0 \right) \\ A'_{p,2} = 2A_{p,1} + D_2 \left(L_2 - \frac{D_1}{2} \right) \\ \text{for } i \text{ odd and } i \geq 3: \\ A'_{p,i} = 2A_{p,i-1} + D_i \left(L_i - \frac{D_{i-1}}{2} - 2^{\frac{i-5}{2}} n_1 D_0 \right) \\ \text{for } i \text{ even and } i \geq 4: \\ A'_{p,i} = 2A_{p,i-1} + D_i \left(L_i - \frac{D_{i-1}}{2} - 2^{\frac{i-4}{2}} D_1 \right) \end{cases} \quad (2.36)$$

Nonetheless, even though this method is more accurate, it excludes a few exceptions such as the one shown in Fig. 2.6 at the level 4 with hatched lines. The widest path includes the extremity of D_1 link, but also two whole paths of elemental volumes which are included in the area calculated. The new ratio of the k_p material ϕ'_i , is evaluated thanks to Eq. (2.33) and Eq. (2.36):

$$\phi'_i = \frac{A'_{p,i}}{A_i} \quad (2.37)$$

An error function is introduced to quantify the deviation between the former method and this new approach. $E_{\phi,i}$ function is defined in Eq. (2.38): it evaluates the relative deviation in function of the assembly level, i , and the number of elemental volumes included in the first construct n_1 .

$$E_{\phi,i} = \frac{|\phi'_i - \phi_i|}{\phi'_i} \quad (2.38)$$

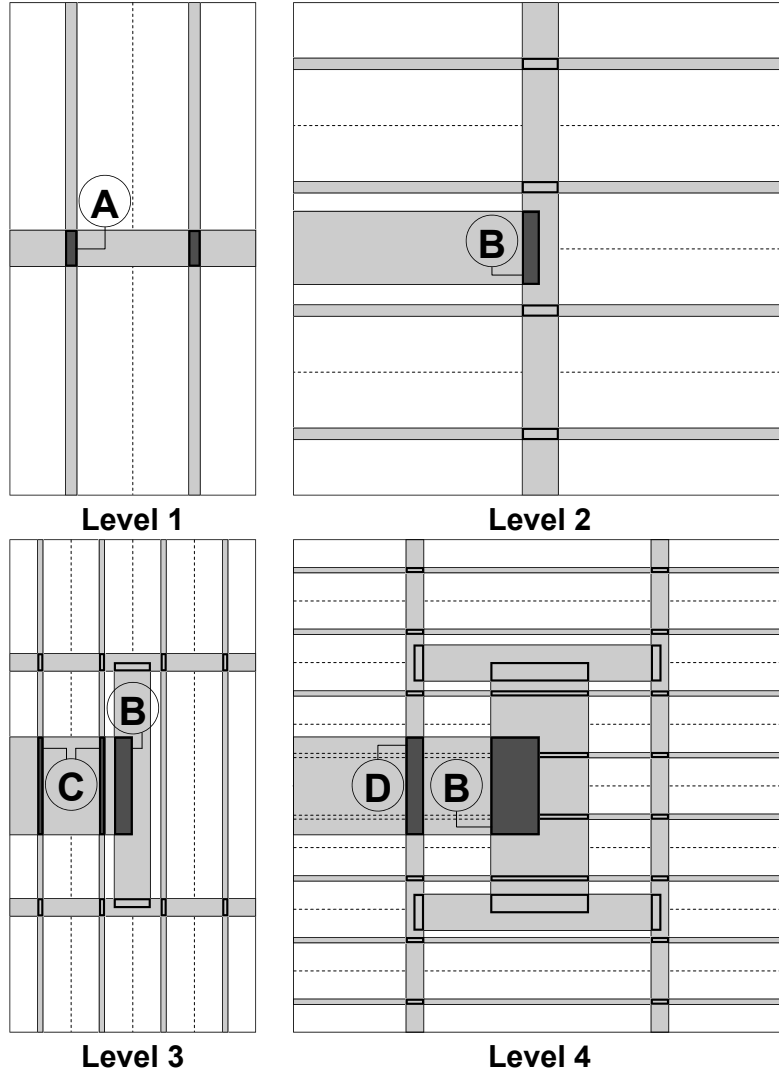


Figure 2.6: First four assembly levels showing the deep gray areas which are included twice in the classical approach.

Fig. 2.7 shows this relative deviation calculated for different configurations and highlights two main points:

- The more the complexity of the structure increases, i.e. the more the number of levels ℓ increases, the more the error is important. For a given number of elemental volumes included in the first construct n_1 , the error is cumulative: the error introduced at the i^{th} construct is retained and amplified at the $(i + 1)^{th}$ construct.
- The error also increases with n_1 , which makes sense: the more elemental volumes are included in the first construct, the more the crossings where the k_p area are counted twice are numerous.

For instance, a third construct including $n_1 = 6$ elemental volumes per first order construct overestimates the actual k_p ratio of 11%. In other words, the classical analytical ratio is $\phi_3 = 31.03\%$ whereas the real one is $\phi'_3 = 27.93\%$. It means that the optimization of the D_i thickness between the first and third construct has been based on an overestimated value of ϕ , deviating the constructal structure from an optimal configuration.

This subsection closes the analytical remarks made about the way to build constructal cooling networks. In the following section, the structures coming from [83] and [102] are analyzed with the

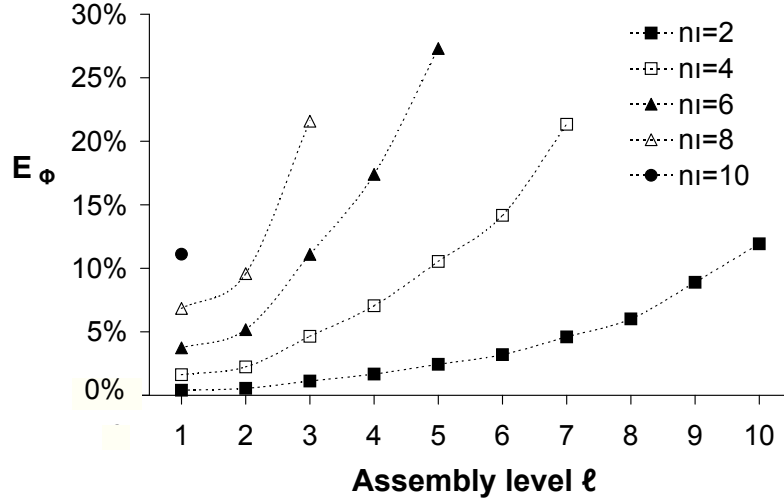


Figure 2.7: ϕ_i error in function of the assembly level ℓ and n_1 by taking into account the crossing between the constructal levels.

help of numerical methods, providing a numerical estimation of their efficiency.

2.5 Comparison of constructal designs

The comparison between the different constructal shapes meets an important issue: in function of the constructal level, the cooling tree-network does not cover the same area, as shown in Fig. 2.3. This obstacle makes difficult to quantify the influence of the network complexity on the cooling efficiency.

Bejan and Dan [107] have proposed to build an “inward” approach in opposition to the “forward” one introduced as so far, in order to constrain the constructal dendritic network to any given rectangular shape of heat generating volume. In other words, the final area is known before beginning the constructal process and the features of the k_p network are adjusted to reach an optimal configuration. However, this method slightly loses the philosophy of constructal theory, which assumes that the features of the final geometry are fully included into the elemental volume. Intrinsically, the “inward” approach moves away from the optimal form by aiming to fit to an external structure.

This section aims to evade this problem proposing a method to create a tree-network inside a finite-size volume knowing its size, without overconstraining the constructal approach. Thereby, it is necessary to define a final shape which naturally exists in the “forward” method, meaning a shape which is involved in Fig. 2.3. Furthermore, a numerical method is introduced to solve the temperature field, which allows:

- having a reliable comparison tool which remains the same for all the tested structures;
- liberating the calculation from physical assumptions, such as the slenderness hypothesis, and obtaining the exact value of the thermal resistance;
- evaluating quickly and easily constructal tree-networks as complex as wished.

This approach should allow making comparisons in order to evaluate the exact efficiency of constructal designs.

2.5.1 Presentation of the problem

The final shape of the volume depends on which constructal approach is tested. Regarding the method introduced by Bejan [83], two kinds of geometry are alternatively defined when increasing the number of constructal levels: a rectangle with an aspect-ratio of two or a square (see the left-size of Fig. 2.3). For Ghodoossi and Egrican [102], the final volume-size is always rectangular with an aspect-ratio of $\sqrt{2}$ (see the right-size of Fig. 2.3). These two approaches are investigated for the even constructal levels in order to evaluate a wider range of structure.

Numerical values must be fixed to apply a numerical scheme allowing calculating the temperature field. Arbitrarily, the edge size where the heat sink is located has been fixed to $a = 100mm$, whatever the constructal method tested. The conductivity ratio is $\hat{k} = 500$, with $k_p = 500W/(m.K)$ and $k_0 = 1W/(m.K)$, and the heat generation rate is set to $10kW/m^3$ through k_0 and k_p material. Moreover, the final ratio of k_p material is a result of the constructal process: as a consequence, the structures which develop a cooling network with a final porosity above 40% are excluded from this study, considering that they are not coherent from an engineering point of view.

The geometries tested lie on another fundamental assumption: unlike constructal theory, it is assumed there is no technological limit concerning the elemental volume size. In other words, the constructal process can start off from any elemental volume, as small as wished. This feature allows considering cooling tree-networks which get more complex.

2.5.2 Equivalence between ϕ and n_1

If the fraction of k_p material for the elemental volume can take any value, it is possible to link ϕ_0 and n_1 between them. In this instance, the number n_1 of elemental volumes included as a part of the first construct becomes an essential parameter of the problem. This methods allows starting constructal designs by setting the geometrical parameters of the cooling network, instead of constructing the structure from the elemental volume.

Eq. (2.4) introduces the optimal ratio for the elemental volume in constructal theory. The correspondence between the elemental volume and the first construct is based on a central assumption: n_1 must be an even integer to pretend to be made up of a sum of optimized smaller volumes. Indeed, if n_1 does not satisfy this requirement, it is not possible to build a first construct having the right shape. That leads to the following equation:

$$\frac{L_1}{H_0} = \frac{n_1}{2} \quad (2.39)$$

Substituting Eq. (2.4) into Eq. (2.39):

$$n_1 = \frac{L_1}{L_0} (\hat{k}\phi_0)^{1/2} \quad (2.40)$$

At this step, both constructal methods can be tackled with this approach, because the optimal features of the first construct are known in function of the ones of the elemental volume. The link between both levels is made thanks to the ratio L_1/L_0 : for [83], this ratio is equal to 1, whereas [102] proves it should be equal to $\sqrt{2}$. In such a case, Eq. (2.40) becomes respectively:

$$\phi_0 = \frac{n_1^2}{\hat{k}} \quad (2.41)$$

$$\phi_0 = \frac{n_1^2}{2\hat{k}} \quad (2.42)$$

It is also possible to establish the width of the elemental high-conductivity path in function of n_1 . By definition, D_0 is equal to:

$$D_0 = \phi_0 H_0 \quad (2.43)$$

Substituting Eq. (2.4) and Eq. (2.41), or Eq. (2.42), into Eq. (2.43):

$$D_0 = 2 \frac{n_1}{\hat{k}} L_0 \quad (2.44)$$

$$D_0 = \sqrt{2} \frac{n_1}{\hat{k}} L_0 \quad (2.45)$$

In the same way, the optimal ratio D_1/D_0 , which is equal to $(\hat{k}\phi_0)^{1/2}$ in both cases, can be reduced to n_1 , respectively $n_1/\sqrt{2}$, thanks to Eq. (2.41) and Eq. (2.42). It is worth to note that the width of the central link draining the heat is the summation of the widths of the k_p links belonging to the elemental volumes for a first order construct coming from [83].

This section aims to show it is possible to substitute ϕ_0 by n_1 in a classical “forward” approach. In a standard case, ϕ_0 , \hat{k} and L_0 are the set of parameters allowing solving the constructal problem. With this new approach, n_1 , \hat{k} and L_0 are sufficient to develop a constructal method.

2.5.3 Recurrence relations of the constructal problem

Both methods introduced in [83] and [102] have recurrence relations allowing knowing the geometrical features of constructal networks. In order to constrain the constructal design inside the square area generating heat, the length L_0 of the elemental volume, as well as the width D_0 of the elemental conductive path, must be expressed in function of the construct order wished, called ℓ and the other geometrical parameters such as a , \hat{k} and n_1 .

2.5.3.1 Recurrence relation of the square constructal problem [83]

In the frame of the original constructal method and if the final assembly level is even, the shape to optimize is a square structure. In this case, L_0 is expressible as:

$$L_0 = \frac{a}{2^{\ell/2}} \quad (2.46)$$

The initial width of the k_p link can be rewritten, thanks to Eq. (2.44) and Eq. (2.46), as:

$$D_0 = \frac{a}{2^{\frac{\ell-2}{2}}} \frac{n_1}{\hat{k}} \quad (2.47)$$

Bejan showed in Ref. [83] that multipliers exist for describing the geometrical features of a given level in function of the previous construct order. These results, combined with this work, allow describing the dimensional parameters of each level by recurrence, only depending on a , n_1 , \hat{k} and ℓ . The length L_i of the different assemblies are given from:

$$\left\{ \begin{array}{l} L_0 = \frac{a}{2^{\ell/2}} \\ L_1 = L_0 \\ L_2 = L_1 \\ \text{for } i \text{ odd and } 3 \leq i < \ell: \\ L_i = L_{i-1} \\ \text{for } i \text{ even and } 4 \leq i \leq \ell: \\ L_i = 2L_{i-1} \end{array} \right. \quad (2.48)$$

The same reasoning can be led about D_i :

$$\left\{ \begin{array}{l} D_0 = \frac{a}{2^{\frac{\ell-2}{2}}} \frac{n_1}{\hat{k}} \\ D_1 = n_1 D_0 \\ D_2 = \frac{4}{\sqrt{3}} \\ \text{for } 3 \leq i \leq \ell: \\ D_i = 2D_{i-1} \end{array} \right. \quad (2.49)$$

Once these parameters have been evaluated, an algorithm able to build the constructal tree-network as complex as wished is required. This algorithm takes the same input parameters as Eq. (2.48) and Eq. (2.49). This approach is fully detailed in Appendix A.

2.5.3.2 Recurrence relation of the rectangular constructal problem [102]

The same reasoning can be led with the works of Ghodoossi and Egrican. However, no distinction is necessary between the odd and even constructal levels, since their approach leads to a rectangular shape with the same aspect-ratio. The only difference coming from the distinction between the levels is made for the calculation of L_0 , due to the change of direction in the constructal network, which is expressible as:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{for } \ell \text{ odd:} \\ L_0 = \frac{a}{2^{\frac{\ell+1}{2}}} \\ \text{for } \ell \text{ even:} \\ L_0 = \frac{a}{2^{\ell/2}\sqrt{2}} \end{array} \right. \quad (2.50)$$

The initial width of the k_p link can be rewritten, thanks to Eq. (2.45) and Eq. (2.50), as:

$$D_0 = \frac{a}{2^{\ell/2}} \frac{n_1}{\hat{k}} \quad (2.51)$$

The authors calculated in Ref. [102] the multipliers existing for describing the geometrical features of tree-networks. Combining with this study, they allow describing the geometry by recurrence, also from a , n_1 , \hat{k} and ℓ . The length L_i of the different assemblies are expressible as:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{if } \ell \text{ odd:} \\ L_0 = \frac{a}{2^{\frac{\ell+1}{2}}} \\ \text{if } \ell \text{ even:} \\ L_0 = \frac{a}{2^{\ell/2}\sqrt{2}} \\ L_1 = \sqrt{2}L_0 \\ \text{for } 2 \leq i \leq \ell: \\ L_i = L_{i-1}/\sqrt{2} \end{array} \right. \quad (2.52)$$

D_i can be evaluated thanks to the same reasoning:

$$\begin{cases} D_0 = \frac{a}{2^{\ell/2}} \frac{n_1}{\hat{k}} \\ D_1 = \frac{n_1}{\sqrt{2}} D_0 \\ D_2 = 2\sqrt{2} D_1 \\ \text{for } 3 \leq i \leq \ell: \\ D_i = 2D_{i-1} \end{cases} \quad (2.53)$$

Eq. (2.52) and Eq. (2.53) allow building the constructal designs coming from Ghodoossi and Egrican.

The algorithm designing the high-conductivity tree-network constructs it from the largest scale toward the smallest one, even though it has been calculated in the opposite direction. Fig. 2.8a shows the seven successive required steps to construct a structure including six constructal levels and four elemental volumes inside the first construct order ($\ell = 6$ and $n_1 = 4$). Appendix A provides an accurate overview of this algorithm, applying a syntax close to the one used in object-oriented programming.

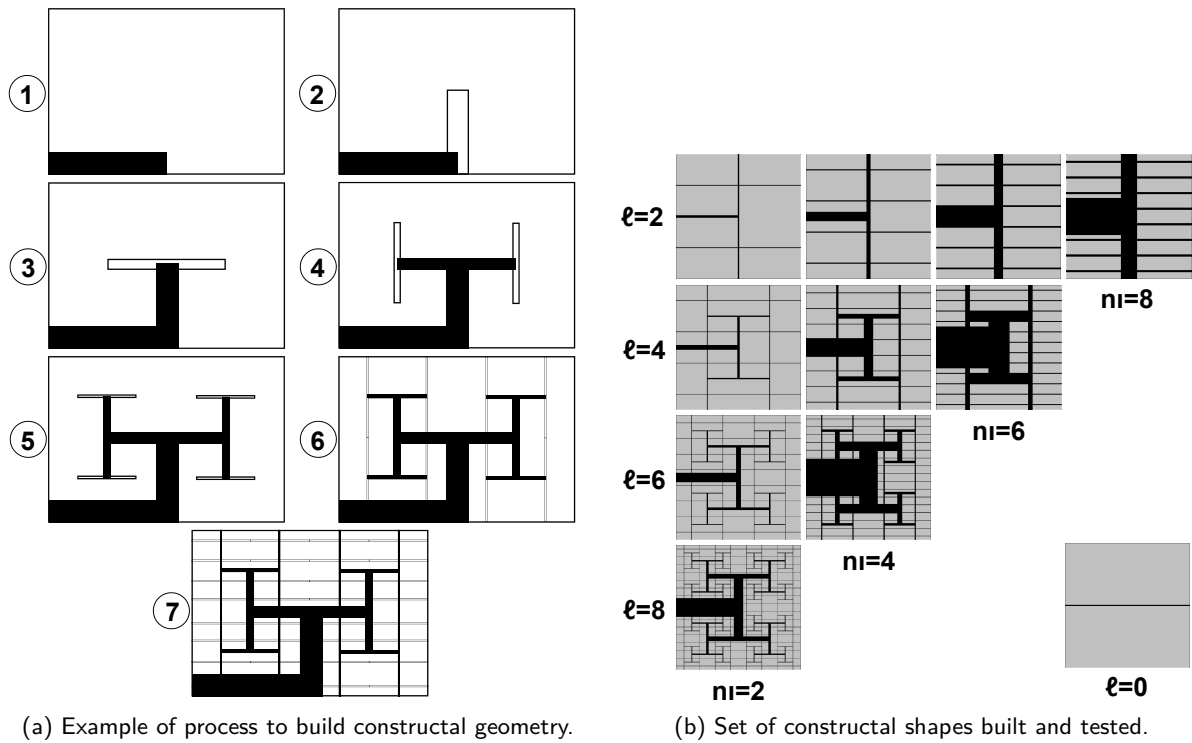


Figure 2.8: Algorithm used to build a set of constructal shapes.

Fig. 2.8b shows all the set of constructal shapes that have been built and tested thanks to the algorithm developed in the present study, for constructal designs coming from [83]. One of the first observation concerns the finite number of possible structures. In certain cases, if the fraction of k_p material is free to vary above 40%, the width of the high-conductivity path belonging to the last level ℓ is wider than the square side a . Under such conditions, an half square is full of the k_p material spilling over the boundaries, which cannot be seen as a valid construct. It was found that the square area can only contains a small dozen of constructal designs.

In Fig. 2.8b, the constructs are classified in function of their assembly level ℓ and the number of elemental volumes included in the first order construct n_1 . Note that an optimized elemental volume covering the whole square area has also been drawn and indexed by $\ell = 0$. A two-sided description of the tree-network studied is possible:

- At isolevel ℓ , the length L_0 of the elemental volumes does not vary in function of n_1 . On the contrary, the elemental volume becomes more and more slender and the width of the high-conductivity path increases.
- At identical number of elemental volumes included in the first element n_1 , the length L_0 is divided into two between two consecutive even levels ℓ . On the other hand, the aspect-ratio of the elemental volumes remains identical irrespective of ℓ .

These remarks are also valid for the constructal networks coming from [102], which are not pictured here because of the lack of space. There are only two minor differences with Fig. 2.8b:

- The area of the finite-size volume is divided into $\sqrt{2}$.
- Fourteen different tree-networks are possible, instead of eleven.

2.5.4 Solver and mesh

Numerical simulations have already been used in the frame of constructal theory and its optimization [99,100,108]. These works use computational codes such as FIDAP [99] or MATLAB [108] and take advantage of non-uniform grids to follow reasonably well the temperature gradients. It is worth to note that [108] provides numerical tests showing the achievement of grid independence. These articles have inspired the numerical methods carried out in the present study.

A special care has been taken regarding the numerical solver used to solve the problem hereupon defined. The commercial software FLUENT has been used to evaluate the temperature field. A third-order scheme using a Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws (MUSCL) reconstruction has been applied to discretize the energy equation on the calculation field. This finite volume method is particularly appropriate to evaluate constructal designs, since it provides highly accurate solution even if the solution exhibit large gradients. Indeed, massive temperature gradients take place inside the constructal design, especially at the interface between k_p and k_0 materials. Moreover, in order to ensure that the numerical convergence is achieved well, its criterion has been fixed at 10^{-15} for each calculation.

Fig. 2.9 shows the mesh used through k_p material and the way to refine it. An unstructured grid, made up of triangular elements, has been defined because it offers more possibilities to adapt it by means of size functions, even though it makes the calculation time longer. Fig. 2.9 also displays two enlargements regarding the way to manage the grid refining for the worst locations. k_0 material is meshed in the same way, using the same size functions as the ones used through k_p material.

The mesh refining is also a fundamental method to describe correctly the temperature gradients. So, the mesh of structures has been refined at the interface between the k_p and k_0 material. The main issue has been to adapt the mesh size to the constructal constraints: for instance, for a structure having eight assembly levels, the width of the k_p link varies between $50\mu m$ and $14.78mm$. It means that the mesh must adapt its size from a few micrometer up to a few millimeter through the k_p material. This constraint leads to structures requiring between one hundred thousand and more than 5 millions of mesh to describe the systems with a good accuracy.

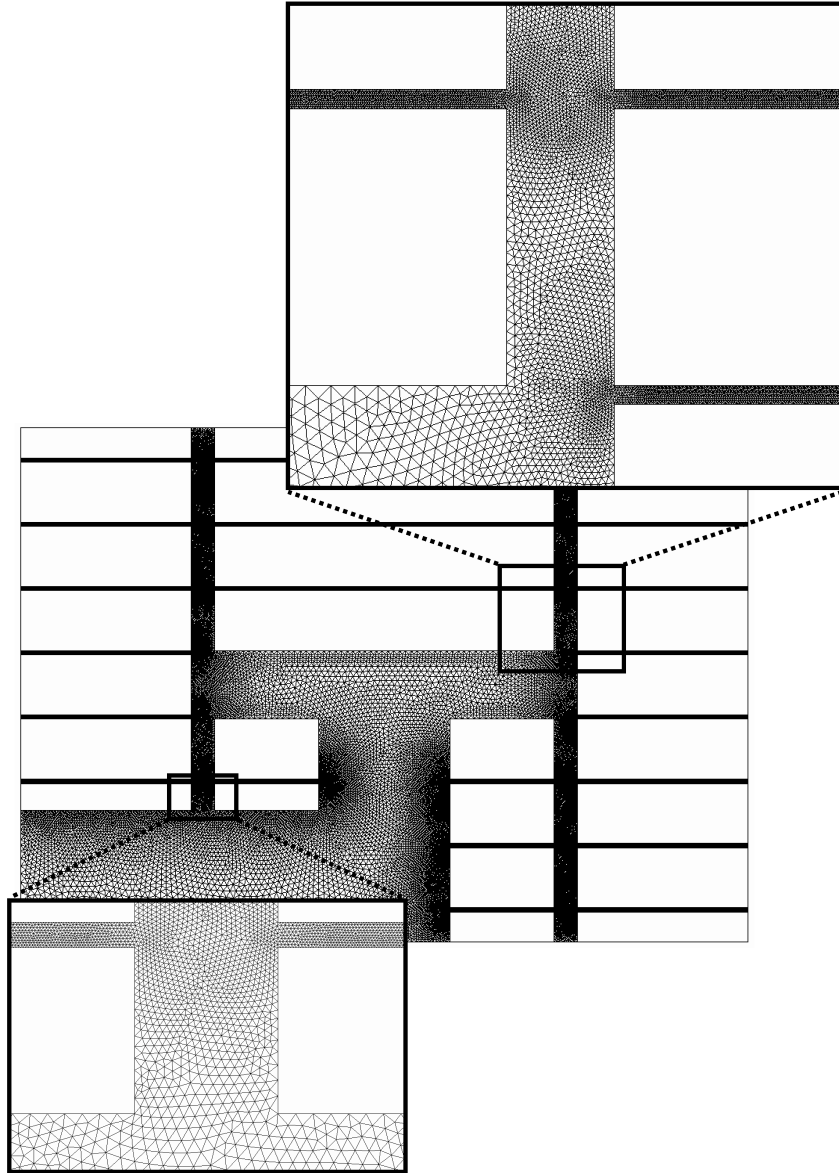


Figure 2.9: Grid used through k_p material to evaluate the temperature field.

Tests have been led to make sure of the absence of correlation between the grid used and the results. As shown in Fig. 2.8b, many different constructal structures have to be evaluated with numerical methods and carrying out a test of grid independence for each of them is not possible. As a consequence, the test has only been made for one geometry and the criterion assuring the grid independence has been transposed to the other configurations. The grid construction is mainly built from size functions which are initialized with the mesh size inside k_p material. In other words, the cell number across the smallest section of k_p material is the main parameter upon which lies the whole grid. The tests show that the grid independence is reached if the cell number across this section > 8 . The independence is said to be achieved when the non-dimensionalized thermal resistance difference between the previous grid tested and the current one $< 5 \cdot 10^{-3}$. So, all the structures have been meshed in such a way that at least 10 finite volumes are included in the width of the smallest k_p path.

2.5.5 Results

The temperature field of constructs coming from [83] and [102] have been solved under the conditions outlined in section 2.5.1. The non-dimensionalized thermal resistance is then evaluated for each case considering the actual area generating heat as in Ref. [83,102,104,106]. It is expressible as:

$$R_{\ell,n_1} = \frac{T(L_\ell, a/2) - T(0, 0)}{q'''A/k_0} \quad (2.54)$$

where A is the area of the finite-size volume, which can be a^2 or $a^2/\sqrt{2}$. This criterion is used to rate the structure in function of their conductance $\hat{k}\phi$, as shown in Fig. 2.10. In this work, \hat{k} has been fixed to 500 which means that the conductance is purely proportional to the fraction of k_p material ϕ . Note that the porosity ϕ is directly evaluated from the numerical models. Beyond the method introduced in section 2.4.2, the direct evaluation of the porosity leads to quantify with accuracy the conductance $\hat{k}\phi$. In addition, from an engineering point of view, only the porosity is an interesting parameter: the purpose of the optimization process is to reduce ϕ keeping the same cooling efficiency, when \hat{k} is constant. Figs. 2.10a and 2.10b display the whole set of tested geometries in function of the non-dimensionalized thermal resistance for both approaches detailed as so far. This does not aim to compare these methods between them, but to discuss the efficiency of constructal theory applied to a finite-size volume generating heat.

Fundamental comments can be made from Fig. 2.10, underlining essential aspects of constructal theory applied to this specific case. For the problem and geometrical configurations considered in this paper :

- On one hand, the reading can be done horizontally following two options: the assembly level ℓ or the number of elemental volumes included in the first construct n_1 can be viewed as constant. If ℓ is constant, for instance $\ell = 2$, the complexity of constructal structures increases with n_1 , from 2 up to 8 for this example. On the contrary, if n_1 is viewed as constant, for example $n_1 = 4$, the complexity of constructions increase with ℓ , from 2 up to 6 for this instance. In both cases, the impact on the thermal resistance is qualitatively the same: its value decreases when the structures become more complex. However, this cannot be only attributed to the increase of complexity because the fraction of k_p material allocated increases as well. So, the main question remains open-ended: does increasing the complexity of structures effectively improve the cooling efficiency?
- On the other hand, the plot can be seen with a vertical reading: only the structures having approximately the same conductance are compared, which means only the structures using roughly the same quantity of k_p material since \hat{k} is constant. In this instance, it is clear that whatever the constructal design, the thermal resistance is quite similar irrespective of the assembly level ℓ or the number of elemental volumes included in the first construct n_1 . In other words, at a constant fraction of k_p material, increasing the complexity does not decrease the thermal resistance.

These outcomes do not support constructal theory from an engineering point of view. Indeed, constructal method aims to improve the cooling efficiency through constructal shapes with increasing complexity, whereas the results reported hereupon show that this is not the case for the finite-size volumes studied here. For instance, for the structures coming from [83], for $\hat{k}\phi \cong 100$, namely $\phi \cong 20\%$, three constructal designs answer to the optimization problem with the same performance $R_{\ell,n_1} \cong 0.0137$, but their complexity level is radically different. A construct such as $\ell = 2$ and $n_1 = 6$ is much easier to construct than a design defined by $\ell = 8$ and $n_1 = 2$.

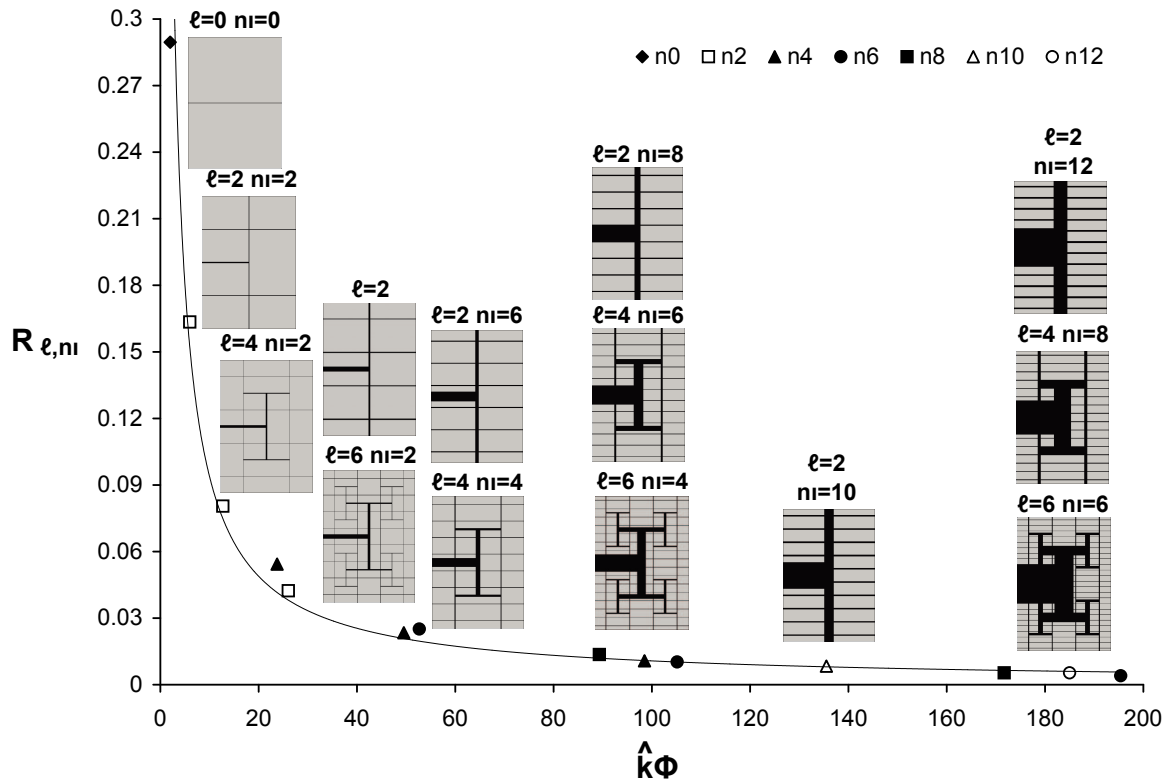
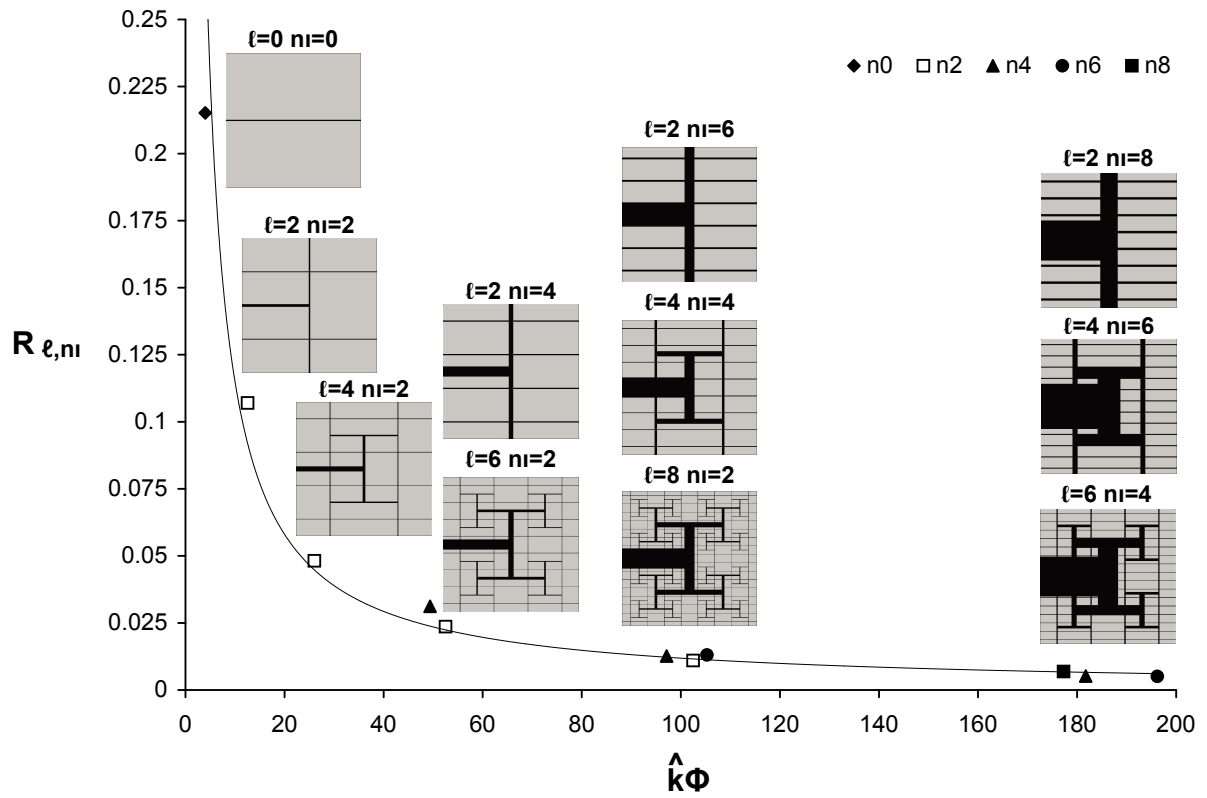


Figure 2.10: Comparison of the efficiency of constructal shapes.

In addition, in Ref. [93], Bejan writes about “*the incentive for manufacturing the smallest elemental system*”, a remark which is not supported by the outcomes of this study as well. The elemental volume of $\ell = 2$ and $n_1 = 6$ is much wider and longer than the ones used by $\ell = 8$ and $n_1 = 2$. Constructing small elements uselessly increase the production cost of the whole structure. In other words, even if the manufacturer has the possibility to made elemental volumes as smaller as he wishes, it is needlessly if he follows a constructal method.

2.6 Conclusion

This work starts with a review of constructal methods used to cool a finite-size volume generating heat, coming from Bejan [83] and later from Ghodoossi and Egrican [102]. After an introduction to constructal theory, section 2.4 gives prominence to the points which deserve a special care during the constructal process: the heat generating rate of k_p material and the way of calculating the porosity.

At first, an important point is clarified regarding the heat generation rate through k_p material. All the previous reasonings [83, 102, 103] used the fin equation to describe conduction inside the high-conductivity material, except the work of Kuddusi and Denton [104]. This equation implicitly assumes that k_p material generates heat in the same way as the k_0 material. This assumption is physically unrealistic since the high-conductivity material is added in order to cool the structure. By taking the same slenderness assumption as Bejan and assuming a non-heat generation rate, an analytical method has been detailed. It was shown to be accurate enough to describe the exact solution in a simpler way than [104].

Secondly, the porosity calculation has been discussed. Section 2.4.2 underlights that the fraction of k_p material is miscalculated in the previous constructal demonstrations [83, 102, 104, 106]. The error introduced is mainly due to the intersections of k_p material slabs which are counted twice during the constructal process. Then, the constructal design deviates from an optimal configuration, assembly level after assembly level, as the porosity ϕ is used as an optimization parameter. Section 2.4 as a whole allows presuming that the final design will not be optimal because of this two approximations made in the previous classical constructal calculation process.

Section 2.5 tackles the constructal problem from another angle: making away from the analytical approach, it confronts the constructal designs between them thanks to a computational code. A method constraining the “forward” approach in a finite-size volume of constant area has been developed, allowing comparing the dendritic structures coming from [83] and [102]. The algorithm used to build them rests on the equivalence between ϕ and n_1 , if there is no geometrical limit concerning the elemental volume.

For the defined problem, the outcomes of this comparison hold with the ones of Ghodoossi and Egrican [102] for both methods: at constant ϕ , increasing the complexity of constructal design does not lead to reduce the thermal resistance. In fact, Fig. 2.10 shows that the cooling efficiency is strongly dependent on the porosity ϕ and not on the complexity ℓ . This result does not support one of the conclusions of constructal theory which advocates to construct elemental volumes as smaller as possible, whereas it is totally useless regarding the cooling efficiency.

However, showing that one application of constructal theory does not work as wished is not enough to discard definitely this method. Is constructal theory feeble in this specific problem dealing with the cooling of a finite-size volume generating heat? Or is it a structural issue coming of constructal theory? In his conceptual study [89], Ghodoossi reviews many applications of constructal theory in different fields. He shows that, most of time, it does not accomplish its task regarding the increase of the flow performance by increasing the complexity of dendritic structures.

Nonetheless, constructal theory remains one of the only deterministic method to solve the “area to point” flow problem and seems to be an unavoidable starting point for who wants to design optimized tree-shaped structures. Many studies proved that methods exist to optimize constructal performances *a posteriori*. Nevertheless, these methods are based on numerical calculations and lose the determinism introduced by constructal theory. They show that constructal process does not lead to an optimal configuration, that is expected regarding the problem dealing with the cooling of the finite-size volume generating heat, according to section 2.4. So, the question seems still open-ended: does a simple and deterministic way exist to optimize the “area to point” flow problem?

2.7 Building algorithm - Appendix

Irrespective of softwares used to build the constructal geometry, the construction principle of the algorithm rests on two *objects*, created from two *constructors*. Contrarily to the calculation process which includes both k_0 and k_p material, the algorithmic method only aims to build the network made up of high-conductivity material. The two objects used are:

- `sys[index]`. It is a cartesian coordinate system, referenced by *index*.
- `link[L,D]`. It is a high-conductivity link, described by its length L and its width D .

Each object has a constructor, which allows building it in function of input data. The constructor of the `sys` object can be written as:

$$\text{new_sys}[\text{new_index}, \text{sys}[\text{index}], L, \theta]$$

where *new_index* is the index of the new coordinate system created. This new system is built from another system, `sys[index]`, and takes two additional parameters in order to define its new position: L and θ . L is the offset following the x -axis and θ is the angle characterizing the anticlockwise rotation between the two system. Fig. 2.11 shows the characteristics of this constructor and the transformation between the two systems.

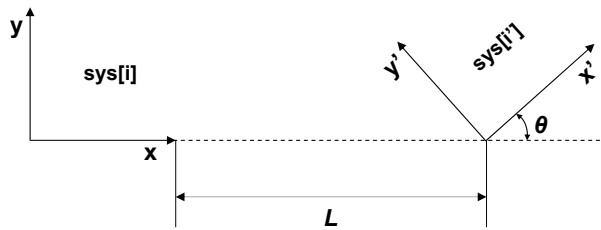


Figure 2.11: Constructor of `sys` object.

The other constructor is relative to a path of high-conductivity material and takes one more parameter in addition to its geometrical features:

$$\text{new_link}[L, D, \text{sys}[\text{index}]]$$

where `sys[index]` is the system used to construct the k_p link, which is a rectangle of L length and D width. The path is built in such a way that the middle of a D edge is centered on the system origin, as shown in Fig. 2.12.

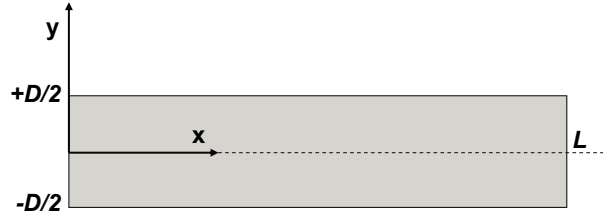


Figure 2.12: Constructor of link object.

The whole process rests on the use of these two constructors inside algorithmic loops, as shown in Table 2.2. The construction starts off with the initialization of the calculation: the last order ℓ is constructed from a system which is merged with the reference one, called *ini*. This first link is D_ℓ wide by L_ℓ long. From this point, a loop i begins describing the assembly level from $i = \ell - 1$ down to $i = 1$. At each step of this loop, a new loop j is made describing all the coordinate systems belonging to the corresponding assembly level i . For each coordinate system, $\text{sys}[j]$, two high-conductivity paths are added on each side with a L_{i+1} offset.

When all the loops j occurred, two steps are important to index properly the coordinate system for the next assembly level. At first, it is necessary to double the number of coordinate system described, which is hold by k . Secondly, to avoid the misunderstanding between the new systems created at the step i and the old ones used at the step $i + 1$, a subscript $(.)'$ has been used. When the new assembly level $i - 1$ begins, the new systems created at the step i must become the old ones in their turn: $(.) = (.)'$.

The last loop is only dedicated to build the k_p material corresponding to the elemental assembly level, indexed with 0. The first loop using the subscript i describes all the coordinate systems included in the first level. The second loop, using the subscript j , allows building as elemental volumes as required, on each side of the D_1 path. There are $n_1/2$ new elements for one side of the first construct. Note that this change in the way of setting up the elements is due to the change in the scale laws driving the constructal design.

2.8 Conclusion à propos de l'approche constructale

Depuis sa publication, l'article présenté ci-dessus a été cité par deux équipes différentes travaillant sur l'amélioration de l'approche constructale :

- Eslami et Jafarpur [109] ont fait mention dans leur introduction de l'analyse concernant l'impact de la complexité sur la performance thermique de la structure constructale.
- Tescari *et al.* [110] ont confirmé les résultats analytiques obtenus dans le cadre de l'optimisation du volume élémentaire, sans production de chaleur dans le matériau k_p .

La problématique délimitée dans le cadre de cette thèse vise à l'optimisation, au sens strict du terme, des systèmes assurant des transferts de masse et de chaleur, dans le contexte de l'ingénierie de composants thermiques optimaux. L'absence d'objectif clair de la théorie constructale, qui semble plus destinée à tenter d'expliquer les structures biologiques d'origine naturelle, couplé à son déterminisme important (le volume élémentaire conditionne l'ensemble de la structure), en font un paradigme peu adapté à une réelle optimisation. Le manuscrit de thèse s'oriente dans les chapitres suivants vers des méthodes plus souples, mais conserve néanmoins deux structures constructales provenant des travaux de Kuddusi et Denton [104] afin d'effectuer des comparaisons entre les différentes méthodes. Les deux solutions constructales retenues sont décrites dans la section 3.1.5.

```

new_sys(0,ini,0,0)
new_link( $L_\ell$ , $D_\ell$ ,sys[0])
k=1

for i= $\ell-1$  to 1 step -1
  for j=1 to k
    new_sys(j',sys[j], $L_{i+1}$ , $\pi/2$ )
    new_link( $L_i$ , $D_i$ ,sys[j'])
    new_sys((j+k)',sys[j], $L_{i+1}$ , $-\pi/2$ )
    new_link( $L_i$ , $D_i$ ,sys[(j+k)'])
  next j
  k=2k
  (.)=(.)'
next i

m=1
for i=1 to k
  for j=1 to  $n_1/2$ 
    new_sys(m,sys[i], $(2j-1)L_1/n_1$ , $\pi/2$ )
    new_link( $L_0$ , $D_0$ ,sys[m])
    m=m+1
    new_sys(m,sys[i], $(2j-1)L_1/n_1$ , $-\pi/2$ )
    new_link( $L_0$ , $D_0$ ,sys[m])
    m=m+1
  next j
next i

```

Table 2.2: Construction algorithm of a level assembly ℓ including n_1 elements for the first construct.

Chapitre 3

Automates cellulaires

Les automates cellulaires reposent sur un paramétrage s'appuyant sur l'entité composant les plus petites échelles des organismes biologiques : la cellule. Plus particulièrement, en suivant un ensemble de règles précises, l'agencement des cellules au niveau microscopique conduit à une structure macroscopique développant des propriétés intéressantes. Wolfram étudie différentes configurations physiques dans son ouvrage de référence [111] défendant principalement l'idée que des structures ordonnées ou chaotiques peuvent émerger d'automates cellulaires guidés par des lois d'évolutions simples et concises. Son exemple phare repose sur un automate cellulaire unidimensionnel à deux états, dit élémentaire, générant le nouvel état d'une cellule en fonction de son état courant et de celui de ses deux cellules voisines. Les règles pouvant guider l'évolution de l'état binaire d'une cellule dans ce cas précis sont au nombre de 256 et sont classées par le code de Wolfram [112]. Une application bi-dimensionnelle de ce principe est le jeu de la vie, introduit par Conway en 1970 [113], qui envisage l'évolution d'une population de cellules en s'appuyant sur les notions de reproduction et de sur- ou sous-population.

Ce chapitre envisage l'application de stratégies inspirées par les automates cellulaires à la problématique introduite par Bejan [83] et donc aux problèmes dits « *volume-to-point* » en thermique. Pour ce faire, l'état binaire des cellules doit traduire un état binaire dans le champ des paramètres physiques : dans le cas de l'allocation optimale de matériau hautement conducteur, la conductivité thermique de chaque cellule oscille entre celle du matériau générant de la chaleur (k_0) et celle du matériau hautement conducteur (k_p). Une fois ce comportement établi, la difficulté est de parvenir à définir des lois d'évolution pertinentes satisfaisant aux critères thermiques : pour ce faire, une stratégie au niveau cellulaire et une stratégie globale ont été étudiées, se basant respectivement sur les travaux de Boichot *et al.* [52] et sur ceux de Xie *et al.* [114]. Les deux méthodes reposent exactement sur les mêmes paramétrages mathématiques, physiques et géométriques, seul leurs lois d'évolution diffèrent :

- Stratégie cellulaire : l'évolution de l'état binaire d'une cellule seule est basée sur un critère thermique local, en l'occurrence la norme du flux thermique qui est directement proportionnelle à la norme du gradient de température. Ce critère permet de déterminer au fil de l'évolution quelles sont les cellules susceptibles de permuter leur état conductif en fonction de l'intensité de leur sollicitation, quantifiée par le flux thermique conduit.
- Stratégie globale : la permutation d'une cellule est effectuée en fonction de sa capacité à satisfaire un objectif précis, dépendant du comportement global de la structure. De fait, cela revient à considérer que chaque cellule a une « conscience » de son rôle au sein de l'organisme qu'elle forme avec ses congénères et qu'elle se meut au mieux pour se mettre au service de l'objectif fixé à la communauté.

Nomenclature

| | | | |
|--------------|---|-------------------------|----------------------------------|
| A | température moyenne adimensionnée | Lettres grecques | |
| c | nombre de nouveaux candidats | α | fraction de N_p à permuter |
| f | fonction objectif | $\Delta x, \Delta y$ | taille des mailles |
| k | conductivité thermique | $\partial\Omega$ | bordure de domaine spatial |
| \hat{k} | rapport de conductivité ($= k_p/k_0$) | Ω | domaine spatial |
| \tilde{k} | conductivité thermique aux interfaces | φ | flux de chaleur |
| M | éléments constituant $\partial\Omega_0$ | ϕ | porosité |
| m | indice des éléments de M | | |
| N | nombre d'automates cellulaires | Indices | |
| n | pas itératif | 0 | k faible / constructal ordre 0 |
| n_1 | nombre de volumes élémentaires | 1 | constructal ordre 1 |
| p | nombre d'automates à permuter | a | automate cellulaire |
| q | taux de génération de chaleur | h, v | horizontal, vertical |
| R | résistance thermique adimensionnée | ini | initial |
| r | rapport constructal H_i/L_i | max | maximum |
| \dot{s} | génération d'entropie | min | minimum |
| \dot{s}''' | taux de génération d'entropie | opt | optimum |
| T | température | p | k élevé |
| \bar{T} | température moyenne | s | puits de chaleur |

Il faut noter que les concepts utilisés par la seconde approche, dénommée Evolutionary Structural Optimization (ESO), s'étendent au-delà de ceux proposés dans ce chapitre, mais la méthodologie développée ici a été volontairement restreinte pour présenter un mimétisme avec celle des automates cellulaires. Les deux méthodes sont donc comparables en tout point, excepté concernant l'implication ou non d'une fonction objectif précise dans le processus d'évolution. En d'autres termes, les comparaisons effectuées dans ce chapitre portent davantage sur l'incidence d'un critère de performance structurel précis dans le processus d'évolution, que sur les algorithmes d'optimisation *stricto sensu*.

3.1 Evolution structurelle par attraction locale

L'idée de mouvoir la matière en se basant sur un critère local pour qualifier la pertinence, ou non, de sa présence dans un champ thermique a été initialement développée par Xia *et al.* [47] en 2002 et Cheng *et al.* [49] en 2003. En s'inspirant de l'idée de la croissance et de la décroissance dans la nature, ils arguent que les parties des organismes biologiques se développant sont ceux qui sont sollicités, et inversement. En se basant sur le gradient de température comme critère de sollicitation, ils développent une méthode dite d'optimisation bionique de régénérescence et dégénérescence des structures. Cependant, très peu d'indications sont fournies à la fois sur la structuration exacte de l'algorithme et sur les paramètres physiques exploitant le critère de sollicitation. Xu *et al.* [53] comparent les résultats de l'optimisation bionique à ceux provenant de la théorie constructale et d'algorithmes métaheuristiques, cette dernière méthode surclassant les deux premières selon les critères de performance établis par les auteurs. Song et Guo [55] ont également comparé ces trois méthodes, mais en cherchant à qualifier la robustesse des structures, c'est-à-dire à caractériser la perte de performances induite par la détérioration des cellules les constituant.

En 2007, Mathieu-Potvin et Gosselin [51] ont proposé une méthode novatrice, basée sur deux critères locaux permutant successivement leur rôle dans le processus de décision : le flux de chaleur et la température. Leur approche permet ainsi d'aborder à la fois la répartition de deux matériaux de conductivités thermiques différentes, mais aussi l'agencement total du domaine de calcul. Ces

travaux ont été suivis par ceux de Boichot *et al.* [52], qui complètent le principe de l'approche bionique en introduisant un critère de convergence structural. Celui-ci permet de contrôler la vitesse de convergence de l'algorithme en maîtrisant au fil des itérations la quantité de matière concernée par le processus d'optimisation.

Cette section s'appuie sur le principe de la déformation des structures par attraction locale du gradient de température, suivant la formulation introduite par Boichot *et al.* [52]. Après avoir introduit son principe algorithmique et présenté les critères physiques considérés pour mesurer les performances des structures, l'influence des différents paramètres physiques est analysée. En dernier lieu, une modification de l'interaction entre les automates cellulaires et la grille de calcul est proposée afin de pallier la création des *checkerboards*.

3.1.1 Introduction

Le problème considéré est identique en tout point à celui introduit dans la section 2.2 concernant la répartition d'un matériau hautement conducteur (k_p) au sein d'un volume fini générant de la chaleur (k_0, q''') et refroidi par un puits de chaleur à la température T_s . Cette configuration physique est régie par l'équation de la chaleur bi-dimensionnelle, en conjonction avec ses conditions limites, et prenant en compte l'aspect bi-matériau : la conductivité thermique locale dépend donc des variables spatiales. La résolution du problème est conditionnée par l'agencement des automates cellulaires, qui déterminent les domaines de haute et basse conductivités thermiques. L'idée développée par Boichot *et al.* [52] est de faire coïncider le champ formé par les automates cellulaires, également appelé champ des variables de contrôle, avec le maillage utilisé pour la discrétisation de l'EDP.

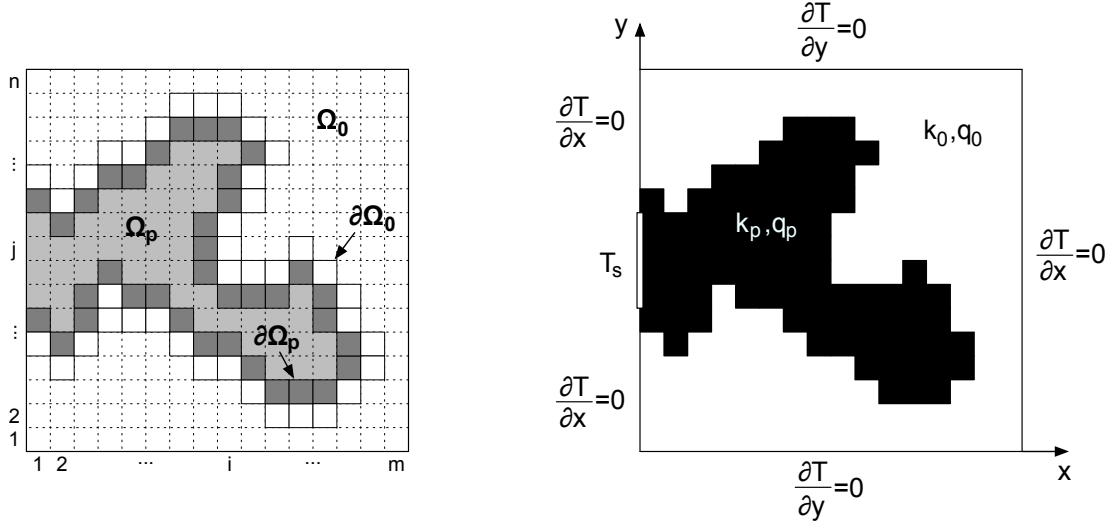
La figure 3.1 juxtapose l'ensemble Ω des automates cellulaires (à gauche), avec celui des paramètres physiques (à droite) pour une configuration aléatoire. L'état binaire des automates cellulaires permet de définir deux sous-ensembles distincts de Ω :

- L'ensemble Ω_p , représenté en gris sur la figure 3.1a définissant des volumes de contrôle à haute conductivité thermique k_p qui forment la structure noire sur la figure 3.1b. L'ensemble des éléments en bordure de Ω_p est noté $\partial\Omega_p$ (en gris foncé), tel que $\partial\Omega_p \subset \Omega_p$.
- L'ensemble Ω_0 , représenté en blanc sur la figure 3.1a définissant les volumes de contrôle à faible conductivité thermique k_0 qui forment la structure blanche complémentaire sur la figure 3.1b. L'ensemble des éléments en bordure de Ω_0 est noté $\partial\Omega_0$ (en blanc détourné par une bordure noire), tel que $\partial\Omega_0 \subset \Omega_0$.

Cette définition permet d'écrire $\Omega = \Omega_0 \cup \Omega_p$ avec $\Omega_0 \cap \Omega_p = \emptyset$. De plus, outre les conductivités thermiques k_0 et k_p , les ensembles Ω_0 et Ω_p définissent des taux de production de chaleur locaux, notés respectivement q_0 et q_p . Cette définition supplémentaire est introduite afin de discuter le problème introduit dans la section 2.4.1.

Le champ de température dans le domaine Ω est régi par l'équation de la chaleur bi-dimensionnelle avec un terme source. Cette équation s'obtient en suivant la même approche que celle développée dans la section 2.3.1, mais sans les hypothèses de prédominance directionnelle du flux de chaleur. Elle ne sera pas établie à nouveau ici, le lecteur est invité à consulter [104] pour une démonstration complète dans un cas similaire. Cette EDP et ses conditions limites s'écrivent :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (k \nabla T) + q &= 0 & \text{sur } \Omega \\ \frac{\partial T}{\partial n} &= 0 & \text{sur } \partial\Omega \\ T &= T_s & \text{sur } \partial\Omega_s \end{aligned} \tag{3.1}$$



(a) Champs des automates cellulaires Ω servant de variables de contrôle. (b) Champ des variables physiques avec les conditions limites associées portant sur la température.

FIGURE 3.1 – Mise en évidence du lien entre les variables de contrôle et la distribution des conductivités thermiques k_p et k_0 dans le domaine de calcul.

où $\partial\Omega$ représente la bordure adiabatique de Ω et l'opérateur $\partial \cdot / \partial n$ indique que la différenciation s'effectue en suivant la normale à cette bordure. $\partial\Omega_s$ symbolise le puits de chaleur sur lequel une condition de Dirichlet est admise, imposant une température constante T_s .

La méthode des Volumes Finis (VF) est mise en œuvre pour résoudre l'équation (3.1) et conduit à la même discrétisation que celle par différences finies utilisée dans [52]. La démonstration complète de la méthode est disponible dans [96], pour une équation de conduction générique bidimensionnelle stationnaire. Adaptée aux notations introduites ci-dessus et au maillage cartésien et régulier présenté sur la figure 3.1a (coïncidant avec les automates cellulaires), celle-ci devient :

$$T_{i,j} = \frac{\tilde{k}_h^{i,j} T_{i-1,j} + \tilde{k}_h^{i+1,j} T_{i+1,j} + \tilde{k}_v^{i,j} T_{i,j-1} + \tilde{k}_v^{i,j+1} T_{i,j+1} + S_{i,j}}{\tilde{k}_h^{i,j} + \tilde{k}_h^{i+1,j} + \tilde{k}_v^{i,j} + \tilde{k}_v^{i,j+1}} \quad (3.2)$$

Cette équation n'est valable que pour des mailles carrées ($\Delta x / \Delta y = 1$) et le terme source est égal à $S_{i,j} = q_{i,j} \Delta x \Delta y$. Les coefficients $\tilde{k}_{h/v}$ représentent les quatre conductivités thermiques aux interfaces qui pondèrent les quatre températures entourant le volume de contrôle indexé (i, j) . Ces valeurs sont donc décalées spatialement d'une demi-taille de maille par rapport au maillage initial. Les automates cellulaires étant centrés sur la grille de température, les différentes valeurs de la conductivité thermique ne sont disponibles qu'au centre des nœuds. Une stratégie est donc nécessaire pour interpoler les valeurs aux interfaces ; la terminologie adoptée ici est celle présentée par Gersborg-Hanse *et al.* [59] qui distinguent deux filtres numériques possibles :

- Moyenne arithmétique :

$$\tilde{k}_h^{i,j} = \frac{k_{i-1,j} + k_{i,j}}{2} \quad \text{et} \quad \tilde{k}_v^{i,j} = \frac{k_{i,j-1} + k_{i,j}}{2} \quad (3.3)$$

- Moyenne harmonique :

$$\tilde{k}_h^{i,j} = 2 \left(\frac{1}{k_{i-1,j}} + \frac{1}{k_{i,j}} \right)^{-1} \quad \text{et} \quad \tilde{k}_v^{i,j} = 2 \left(\frac{1}{k_{i,j-1}} + \frac{1}{k_{i,j}} \right)^{-1} \quad (3.4)$$

Pour une conduction dans un milieu unidimensionnel, il est démontré en se basant sur l'égalité des flux aux interfaces que la valeur de \tilde{k} issue de la moyenne harmonique est l'approximation exacte de la conductivité thermique interfaciale. Néanmoins l'influence des deux types de filtre sera examinée ici, dans le but d'établir la sensibilité des solutions aux paramètres numériques.

Une fois les coefficients de l'équation (3.2) établis pour chaque volume de contrôle et les conditions limites apposées, un système matriciel $\mathbf{KT} = \mathbf{Q}$ est construit, où \mathbf{K} est une matrice penta-diagonale symétrique s'appuyant sur les conductivités $\tilde{k}_{h/v}$. Ce système est résolu à l'aide d'une méthode itérative tel que le gradient conjugué [115] et permet de déterminer le champ de température \mathbf{T} , qui est à la base de l'algorithme développé ci-dessous.

3.1.2 Principes de fonctionnement

Cette section présente le principe de fonctionnement des automates cellulaires, puis introduit les critères physiques qui sont utilisés pour caractériser leurs performances.

3.1.2.1 Algorithme

La figure 3.2 présente les différentes étapes de l'algorithme au cours d'une itération, à partir d'une configuration aléatoire des domaines Ω_0 et Ω_p , présentée sur la figure 3.2a. Chaque itération est composée de trois étapes, qui sont respectivement décrites ci-après.

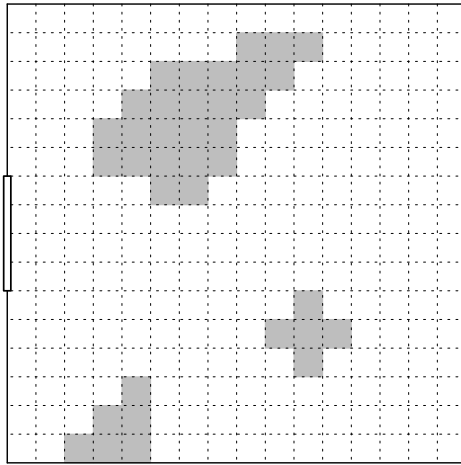
1. **Identification de $\partial\Omega_0$ et $\partial\Omega_p$** : un module permet d'identifier les frontières de chacun des sous-domaines. Pour ce faire, chaque élément du domaine Ω est testé successivement sur la base de deux critères successifs : appartient-il à Ω_0 ou à Ω_p ? Une de ses quatre cellules voisines (nord, sud, est ou ouest) appartient-elle à un sous-domaine opposé ? Par définition, les éléments jouxtant le puits de chaleur appartiennent toujours à $\partial\Omega_0$, sauf si ils sont déjà implantés avec du matériau hautement conducteur k_p .
2. **Identification des $2p$ éléments de $\partial\Omega_0$ et $\partial\Omega_p$** : parmi les automates cellulaires appartenant à $\partial\Omega_0$ et $\partial\Omega_p$, p -paires d'éléments vont être permutées. Les automates cellulaires participant à la permutation sont sélectionnés sur les bases suivantes :
 - pour $\partial\Omega_0$: les p -éléments véhiculant le flux de chaleur le plus important seront implantés avec du matériau hautement conducteur k_p , afin de réduire la sollicitation thermique dont ils font l'objet.
 - pour $\partial\Omega_p$: les p -éléments possédant le flux de chaleur le moins important seront dés-implantés du matériau k_p , puisque que peu sollicités thermiquement, afin de libérer de la matière hautement conductive pour les positions de $\partial\Omega_0$ la requérant.

La norme du flux de chaleur pour un élément (i, j) , critère de permutation, est discrétisée à l'aide d'un schéma du second ordre en différence centrée, tel que :

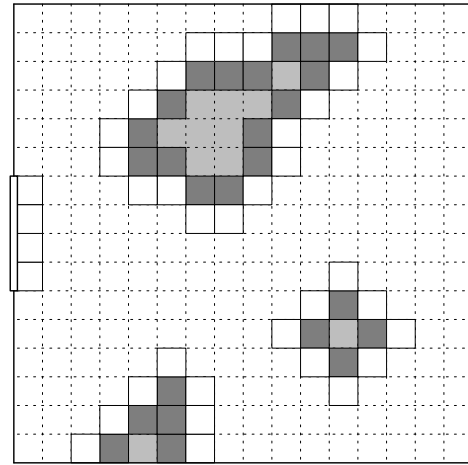
$$|\varphi_{i,j}| = k_{i,j} |\nabla T_{i,j}| = k_{i,j} \sqrt{\left(\frac{T_{i+1,j} - T_{i-1,j}}{2\Delta x}\right)^2 + \left(\frac{T_{i,j+1} - T_{i,j-1}}{2\Delta y}\right)^2} \quad (3.5)$$

L'influence du schéma de discrétisation est examinée dans la section 3.1.4.2.

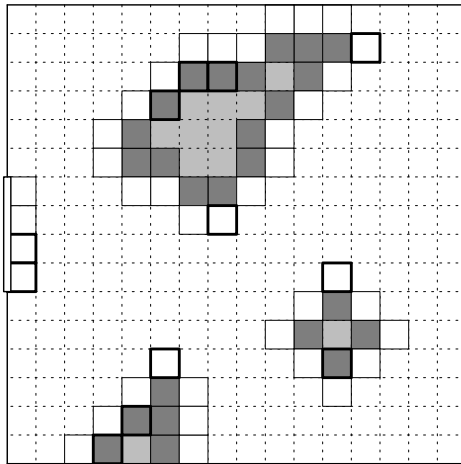
3. **Permutation** : les $2p$ -éléments sélectionnés sont permutés pour former une nouvelle structure, telle que présentée sur la figure 3.2d. Cette nouvelle configuration nécessite d'établir le nouveau champ de température qui lui est associé, par le biais de la méthode des volumes finis.



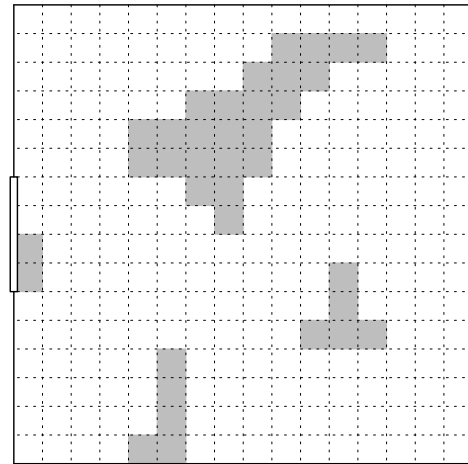
(a) **Structure initiale** - $\Omega = \Omega_0 \cup \Omega_p$.



(b) **Identification de $\partial\Omega_0$ et $\partial\Omega_p$** - les éléments jouxtant le puits de chaleur appartiennent à $\partial\Omega_0$.



(c) **Identification des $2p$ éléments de $\partial\Omega_0$ et $\partial\Omega_p$** - caractéristiques : $N_p = 36$, $\alpha = 1/6$ et $p = 6$.



(d) **Structure finale.**

LEGENDE

| | | | | | |
|---|------------------------------|------------|---------------------------------------|----------------|----------------|
| — | condition limite adiabatique | □ (dotted) | élément de Ω | ■ (light gray) | |
| ▬ | puits de chaleur à T_s | □ (white) | élément de frontière $\partial\Omega$ | ■ (dark gray) | |
| | | □ (black) | élément à permuter | ■ (black) | |
| | | | matériau k_0 | | matériau k_p |

FIGURE 3.2 – Quatre étapes clés de la modification de la structure par l'attraction locale de la matière basée sur la norme du flux de chaleur.

Le nombre d'éléments permutés à chaque itération étant le même dans les deux ensembles $\partial\Omega_0$ et $\partial\Omega_p$, la porosité ϕ du domaine, définie comme le rapport $|\Omega_p|/|\Omega|$, est constante au fil du processus. L'algorithme présenté ici évolue à la manière d'une suite, le résultat à l'itération n dépendant de la structure au pas précédent $n-1$. Ces deux remarques conduisent à définir une structure de départ pour $n = 0$ dont la porosité ϕ est celle désirée et en prenant garde à ce que cette topologie initiale ne laisse pas d'empreinte durable dans le processus itératif. Boichot *et al.* [52] s'appuient principalement sur des structures constructales pour cette étape d'initialisation, mais montrent également qu'il est possible d'atteindre un résultat cohérent à partir d'un ensemble de structures semi-compactes rectangulaires. La démarche adoptée dans l'étude ci-dessous fait un pas de plus, en initialisant l'ensemble des structures aléatoirement, la matière hautement conductrice étant distribuée à la manière d'un bruit dans le domaine Ω .

L'algorithme complet est présenté figure 3.3 et reprend l'enchaînement des différentes étapes présentées ci-dessus. Le problème majeur de cette méthode est de déterminer un critère d'arrêt fiable, permettant d'établir la convergence structurelle du résultat. En effet, d'une certaine façon, l'algorithme crée lui-même les conditions nécessaires à la permutation continue de la structure, puisque l'implantation locale d'un élément hautement conducteur k_p génère dans son voisinage immédiat un gradient de température, qui sera dès lors propice à être implanté avec k_p également. Une fois que l'agglomérat de matériau conducteur est suffisamment développé, celui-ci tend à disparaître puisque chaque élément pris indépendamment convoie de plus en plus faiblement le flux de chaleur. A partir d'une taille minimale critique, celui-ci tend à grossir à nouveau, oscillant ainsi perpétuellement entre plusieurs états différents.

Ce problème peut être évité en diminuant au fil du processus itératif le nombre d'éléments p concernés par la permutation. Celui-ci est établi en suivant la loi linéaire suivante :

$$p = \alpha_{ini} \left(1 - \frac{n}{n_{max}} \right) N_p \quad (3.6)$$

Cette fonction nécessite que le nombre maximal d'itérations dont l'algorithme dispose pour converger, noté n_{max} , soit fixé *a priori*. N_p représente le nombre d'automates cellulaires composant le sous-domaine Ω_p et α_{ini} est la fraction initiale de ce sous-domaine permettant de déterminer le nombre initial des $2p_{ini}$ éléments visés par la permutation (en général $\alpha_{ini} = 0.5$ et $n_{max} = 500$). En d'autres termes, le taux de permutation p est fixé par une fraction du nombre d'éléments hautement conducteurs et celui-ci diminue au cours du processus itératif, atteignant 0 lorsque $n = n_{max}$.

3.1.2.2 Pseudo-fonctions objectif

Les automates cellulaires ne s'appuient que sur des grandeurs locales pour se mouvoir et il est donc nécessaire de définir des grandeurs physiques globales permettant d'examiner leur impact sur l'ensemble du domaine Ω . Celles-ci permettront à la fois de décrire le processus d'évolution des structures, mais également de comparer leurs performances en fonction des différents paramètres numériques.

Résistance thermique. Le premier critère est la résistance thermique introduite par la théorie constructale dans le cas d'un volume fini générant de la chaleur (voir équation (2.5)). Néanmoins, afin de prendre en compte le caractère asymétrique de certaines géométries, celle-ci est définie comme :

$$R = \frac{0,5 [T(0, H) + T(L, H)] - T_s}{qLH/k_0} \quad (3.7)$$

où L et H sont respectivement la longueur et la hauteur du domaine de calcul. En supposant que les extrémités supérieures et inférieures droites du domaine soient les plus chaudes, car les plus

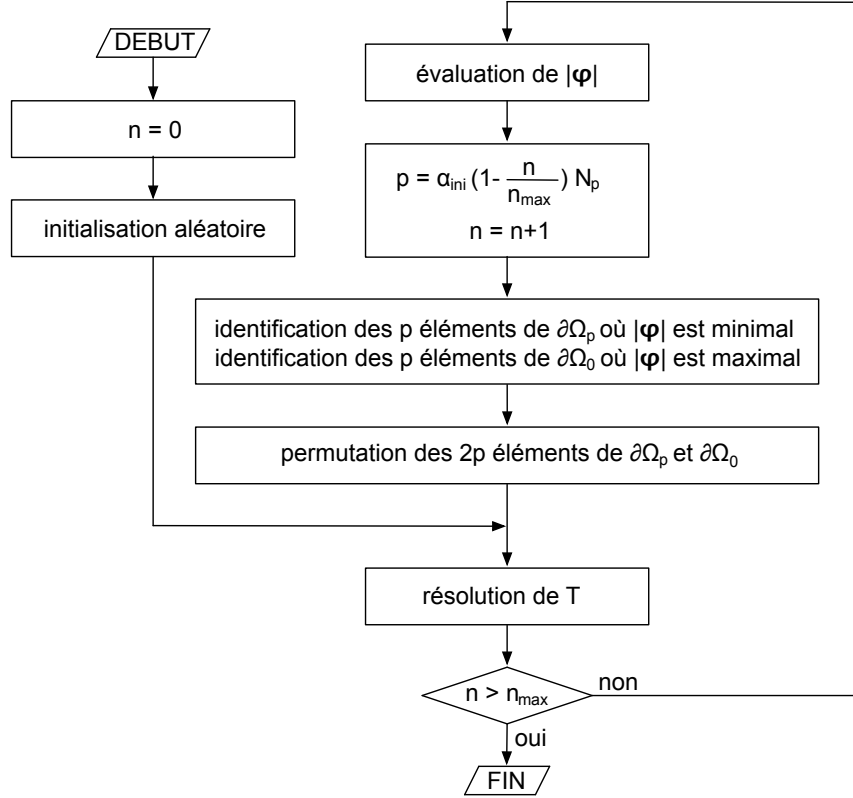


FIGURE 3.3 – Algorithme de modification de la structure par l'attraction locale de la matière basée sur le gradient température.

éloignées du puits de chaleur, R donne un ordre de grandeur de la plus grande résistance thermique adimensionnelle que rencontre le flux de chaleur pour traverser Ω de part en part.

Moyenne de température adimensionnalisée. Le second critère développé s'inspire de l'approche constructale et propose d'évaluer les structures à partir de leur moyenne de température adimensionnée :

$$A = \frac{\bar{T} - T_s}{qLH/k_0} \quad (3.8)$$

où \bar{T} représente la moyenne du champ de température. A représente la moyenne des résistances thermiques s'établissant entre chaque élément du domaine et le puits de chaleur, reflétant de façon plus juste l'impact de la structure hautement conductrice sur l'ensemble du domaine Ω .

Génération d'entropie. Le critère local sélectionnant les éléments à permuter est basé sur la norme du flux de chaleur, et donc de fait sur le gradient de température. Le troisième critère global étudié est relatif au taux de génération d'entropie de la structure, puisqu'il fait intervenir explicitement la norme du gradient de température dans son évaluation. Le taux local de génération d'entropie dans un solide produisant de la chaleur, comme démontré par Bejan [116], est :

$$\dot{s}''' = \frac{k}{T^2} (\nabla T)^2 + \frac{q}{T} \quad (3.9)$$

et s'exprime en $W/(m^3.K)$. En discrétisant et intégrant l'équation (3.9) sur l'ensemble du domaine, l'expression de sa génération d'entropie est, en W/K :

$$\dot{s} = \Delta x \Delta y \sum_{i,j} \frac{k_{i,j}}{T_{i,j}^2} \left[\left(\frac{T_{i+1,j} - T_{i-1,j}}{2\Delta x} \right)^2 + \left(\frac{T_{i,j+1} - T_{i,j-1}}{2\Delta y} \right)^2 \right] + \frac{q_{i,j}}{T_{i,j}} \quad (3.10)$$

3.1.3 Résultats

Cette section examine les résultats obtenus à partir de la méthode présentée ci-dessus. L'analyse y est scindée en deux parties, visant successivement le processus de convergence et l'influence des paramètres numériques et physiques prenant part au processus itératif.

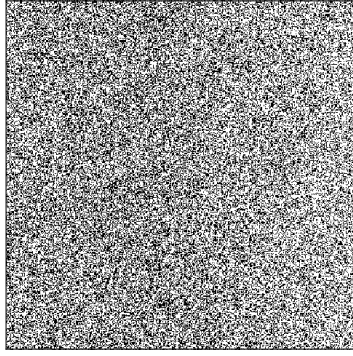
Le cas de base étudié s'appuie sur un domaine Ω carré de côté $L = H = 0,1 m$ et dont le puits de chaleur couvre 20 % au centre de la face ouest à une température $T_s = 300 K$. La porosité globale est fixée à $\phi = 40 \%$ et les conductivités thermiques de Ω_0 et Ω_p sont respectivement $k_0 = 1 W/(m.K)$ et $k_p = 100 W/(m.K)$. La génération de chaleur est la même pour ces deux domaines : $q_0 = q_p = 10 kW/m^3$. Les automates cellulaires évoluent sur un maillage composé de 400×400 éléments, chacun coïncidant avec les volumes de contrôle du schéma VF. Le filtre numérique appliqué pour celui-ci est de type arithmétique. Chaque partie de cette section mentionne le paramètre variant pour les besoins de l'analyse, les autres valeurs restant celles du modèle générique décrit ci-dessus.

3.1.3.1 Analyse de la convergence

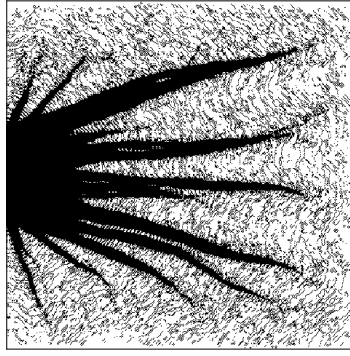
La figure 3.4 présente neuf structures traçant l'évolution de l'algorithme, à partir d'un champ aléatoire d'automates cellulaires (figure 3.4a) jusqu'à sa convergence structurelle complète (figure 3.4i). Dès les premières itérations, une structure dendritique d'ordre 1 se forme et évolue ensuite légèrement en agglomérant de plus en plus de matériau hautement conducteur dans sa périphérie. À partir de l'itération 300, quelques ramifications secondaires apparaissent dans la partie la plus éloignée du puits de chaleur, formant les échelles d'ordre 2. Enfin, les 100 dernières itérations sont consacrées à l'établissement des structures d'ordre 3, le long des premières et secondes échelles, dont l'épaisseur est du même ordre de grandeur que la taille d'une cellule. La relative simplicité de la méthode permet d'obtenir un niveau de détail important.

La figure 3.5 présente l'évolution des principales caractéristiques physiques au fil des itérations. En premier lieu, les figures 3.5a et 3.5b indiquent toutes deux une décroissance quasi-linéaire des valeurs de R et A , à l'exception des cinq premières itérations. Il y apparaît clairement que la minimisation de R s'effectue avec plus de bruit que celle de A , dont la décroissance est avérée à chaque nouvelle itération. Cette caractéristique s'explique par le fait que R traduit la performance de la distribution du matériau k_p à deux échelles différentes : une échelle macroscopique concernant l'ensemble du domaine Ω et une échelle plus microscopique concernant la distribution du matériau hautement conducteur autour des points $(0, H)$ et (L, H) . En d'autres termes, la performance générale est bien améliorée par l'agencement successif des automates cellulaires, comme le prouve la décroissance globale de R , mais celle-ci oscille en raison des changements dans l'arrangement de k_p aux abords des coins supérieurs et inférieurs droits. Cette tendance à l'oscillation est amortie au fil des itérations, puisque le nombre d'éléments p à permuter tend vers 0.

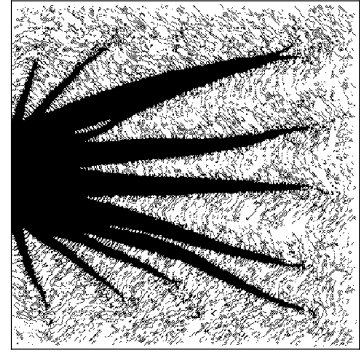
La décroissance linéaire de R et A peut laisser croire que de meilleures performances sont possibles en augmentant le nombre d'itérations n_{max} . Plusieurs tests ont montré qu'il n'en était rien : les critères R et A finaux varient très peu tant que la valeur de $n_{max} \geq 250$. En d'autres termes, le nombre maximum d'itérations influe sur la vitesse de décroissance des fonctions, mais pas sur la structure définitive. L'expérience montre également que pour des valeurs trop faibles de n_{max} , les automates cellulaires définissant Ω_p se figent trop rapidement dans une configuration disparate et



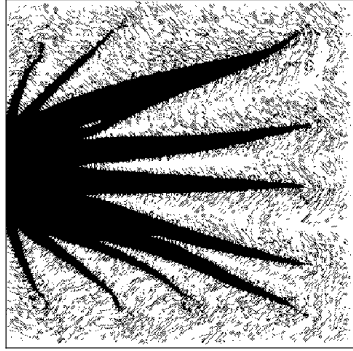
(a) itération 1



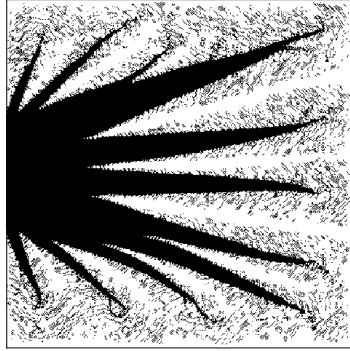
(b) itération 60



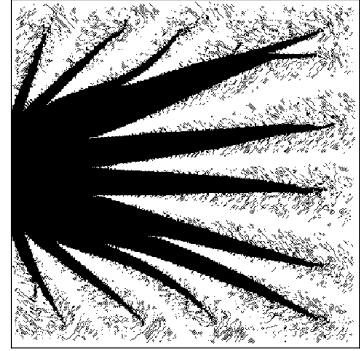
(c) itération 120



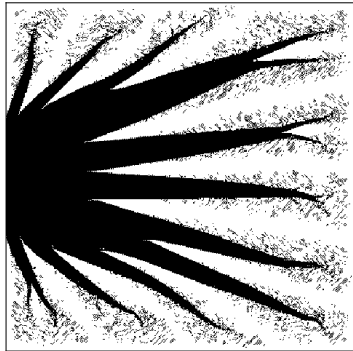
(d) itération 180



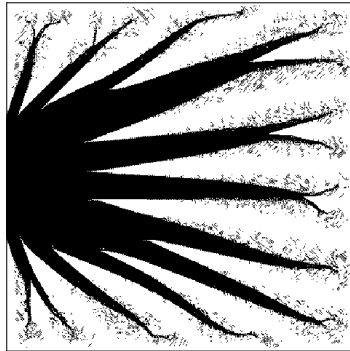
(e) itération 240



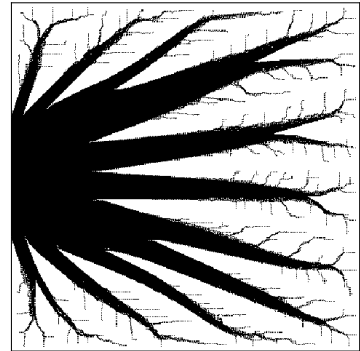
(f) itération 300



(g) itération 360

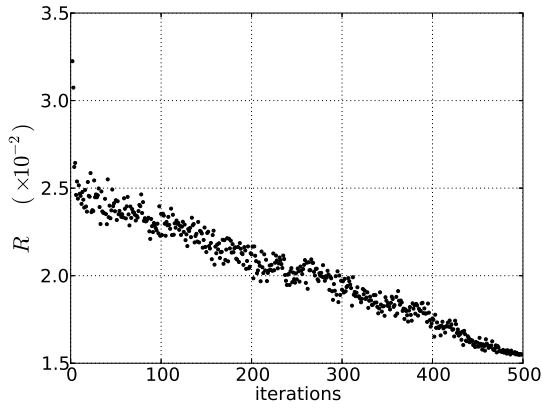


(h) itération 420

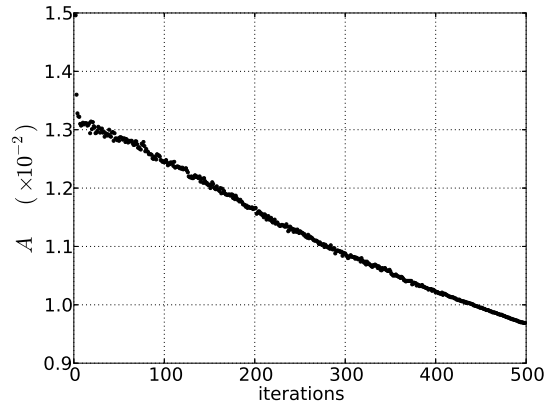


(i) itération 500

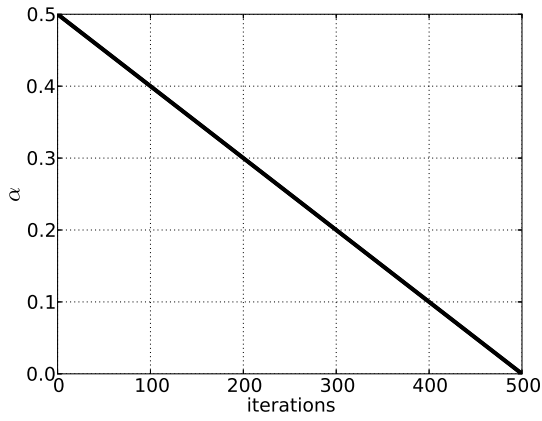
FIGURE 3.4 – Evolution de la convergence structurelle au fil des itérations : $n_{max} = 500$, 400×400 mailles, filtre arithmétique, $\phi = 40\%$, $\hat{k} = 100$, $q_0 = q_p = 10 \text{ kW}/\text{m}^3$.



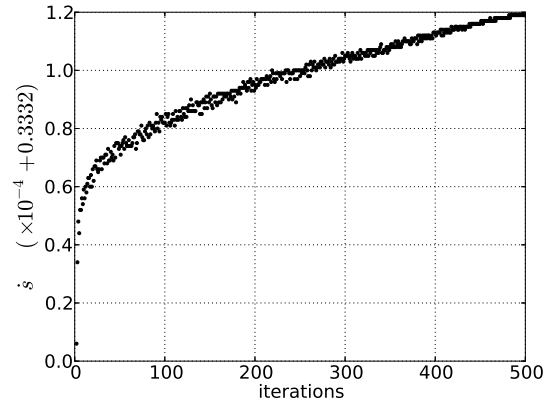
(a) Résistance thermique adimensionnée R



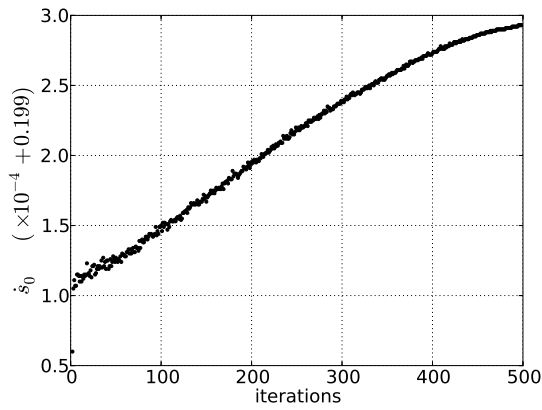
(b) Température moyenne adimensionnée A



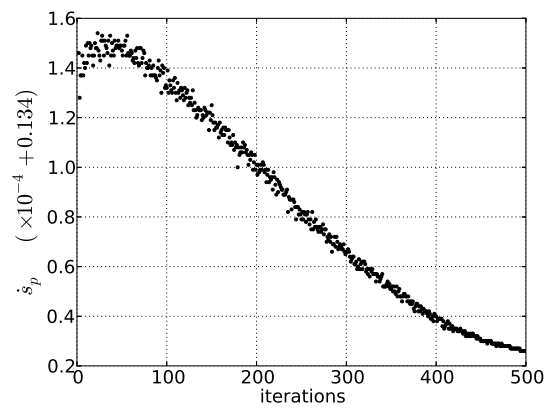
(c) Taux de permutation α



(d) Taux de génération d'entropie \dot{s}



(e) Taux de génération d'entropie \dot{s}_0



(f) Taux de génération d'entropie \dot{s}_p

FIGURE 3.5 – Evolution des principaux paramètres physiques de la structure : $n_{max} = 500$, 400×400 mailles, filtre arithmétique, $\phi = 40\%$, $\hat{k} = 100$, $q_0 = q_p = 10 \text{ kW/m}^3$.

non-optimale au sens des pseudo-fonctions objectifs. Par ailleurs, la décroissance linéaire du taux de permutation α , présentée sur la figure 3.5c, est un choix arbitraire et d'autres fonctions ont donc été examinées, avec des caractéristiques plus convexes ou concaves, sans qu'une influence significative puisse être établie. Néanmoins, au-delà d'une vitesse de décroissance raisonnable sur un segment itératif particulier, un « figement » trop précoce de la structure est également observé. Ces observations incitent donc à conserver la loi de décroissance de α décrite par l'équation (3.6) avec $n_{max} = 500$.

La figure 3.5d détaille l'évolution de la génération d'entropie au cours du processus d'optimisation, telle qu'explicitée par l'équation 3.10. Celle-ci augmente avec un léger bruit à partir de la structure aléatoire initiale, les automates cellulaires ne favorisant pas sa minimisation *a priori*. Afin de mieux comprendre ce phénomène, l'intégration du taux de génération d'entropie \dot{s}''' a été réalisée distinctement sur les deux sous-domaines Ω_0 et Ω_p , permettant d'établir leur entropie générée respective, notées \dot{s}_0 et \dot{s}_p . Les résultats sont présentés figures 3.5e et 3.5f, soulignant deux évolutions contraires :

- L'entropie générée au sein de k_0 augmente de façon significative. En effet, plus le matériau k_p est structuré, plus le flux de chaleur est absorbé efficacement en créant un important gradient thermique au sein de Ω_0 , ce qui contribue à l'augmentation de \dot{s}_0 .
- L'entropie générée au sein de k_p diminue, après être passée par un maximum pour $n = 50$. Tant qu'un embryon de structure hautement conductrice n'est pas connecté au puits de chaleur, les gradients de température peuvent être importants au sein de k_p . En revanche, plus le domaine Ω_p devient continu, plus la température y est homogène en raison de la conductivité thermique importante, y réduisant de fait \dot{s}_p .

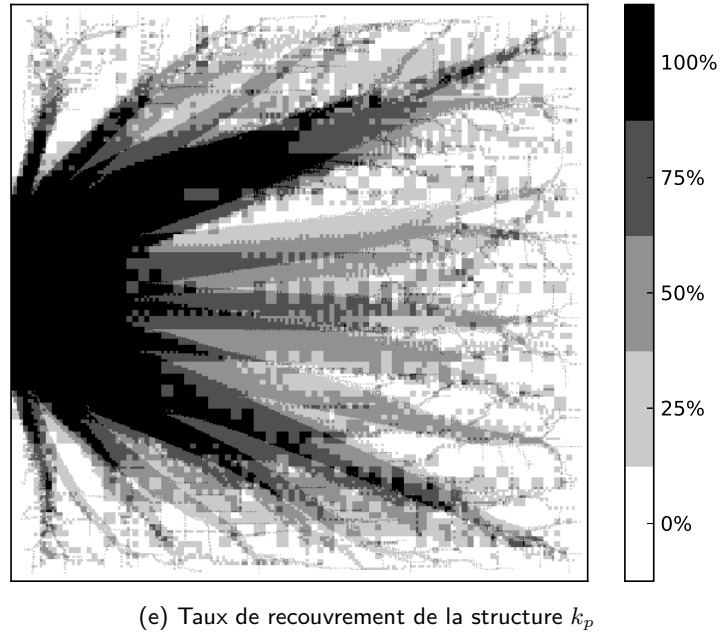
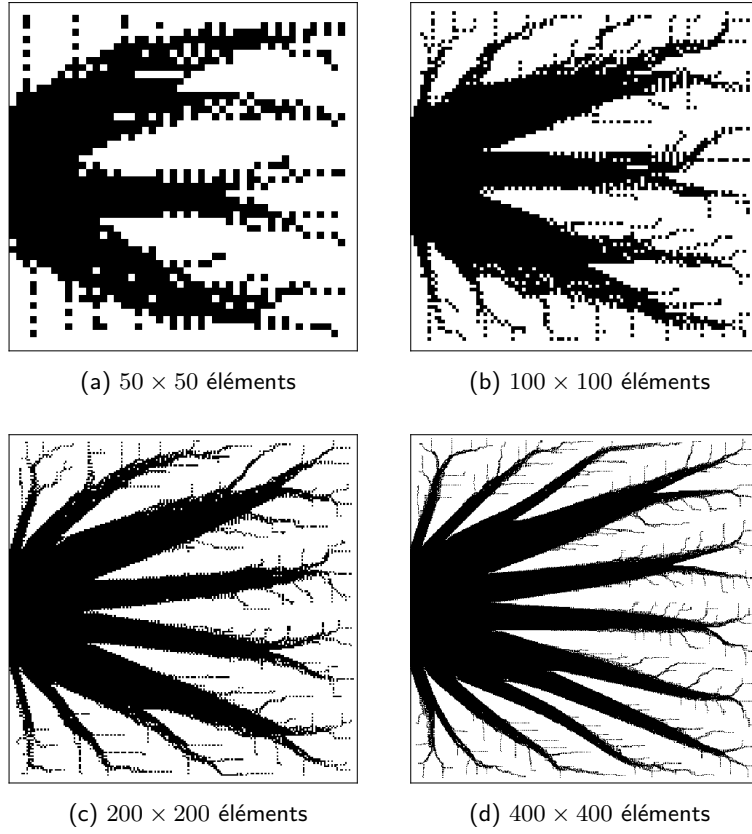
Outre les tendances de l'évolution de \dot{s} , il faut souligner que sa variation globale est très faible, inférieure à 0,2% dans le cas étudié, remarque également valable pour \dot{s}_0 et \dot{s}_p . De fait, l'ensemble des observations faites à propos de la génération d'entropie conduisent à l'abandon de ce critère pour juger de la performance des structures : sa faible variation, couplée aux sens de variation dépendant du sous-domaine considéré, n'en font pas un critère fiable de comparaison, ce qui n'enlève rien à son intérêt physique intrinsèque.

3.1.3.2 Influence des paramètres numériques et physiques

Deux paramètres numériques sont examinés dans cette section : l'influence de la taille du maillage et celle du filtre numérique utilisé dans la méthode des volumes finis. Une fois leur valeur optimale déterminée, l'influence des paramètres physiques tels que la génération de chaleur q_p , la porosité ϕ et le ratio de conductivité $\hat{k} = k_p/k_0$ sont étudiés.

Indépendance de la solution au maillage. Les quatre figures de 3.6 (a à d) présentent les structures obtenues à partir des mêmes critères géométriques et physiques, mais pour des maillages cartésiens impliquant respectivement 2 500, 10 000, 40 000 et 160 000 éléments. Structurellement, la forme de base, c'est-à-dire l'échelle d'ordre 1, se dégageant de chaque structure est identique : elle est composée de ramifications majeures s'étendant du puits de chaleur vers l'autre extrémité du domaine, d'une épaisseur moyenne ayant un ordre de grandeur légèrement inférieur à celui du puits de chaleur. En revanche, les dendrites des ordres 2 et 3 y sont raccrochées aléatoirement, ne permettant pas d'établir une distribution type qui suivrait un modèle de récurrence.

La figure 3.6e illustre ces deux remarques. Les structures obtenues à partir des quatre maillages différents sont superposées et le taux de recouvrement des sous-domaines Ω_p est évalué. Pour une maille donnée, un taux de recouvrement local de 100 % correspond donc à la présence de matériau



| Automates cellulaires | $R (\times 10^{-2})$ | $A (\times 10^{-3})$ | temps CPU |
|-----------------------|----------------------|----------------------|-----------|
| 50×50 | 1,73 | 10,9 | 0,5 h |
| 100×100 | 1,67 | 10,3 | 1 h |
| 200×200 | 1,59 | 9,93 | 4 h |
| 400×400 | 1,55 | 9,70 | 12 h |

(f) Comparaison des performances

FIGURE 3.6 – Structures obtenues à partir de 4 maillages différents : filtre arithmétique, $\phi = 40\%$, $\hat{k} = 100$, $q_0 = q_p = 10 \text{ kW/m}^3$.

k_p dans les quatre structures. Inversement 0% correspond à l'absence de présence de matériau hautement conducteur, et donc à un recouvrement complet par le sous domaine Ω_0 . Les structures primaires apparaissent relativement nettement en noir, avec notamment les deux dendrites principales s'étendant du puits de chaleur vers les coins opposés. *A contrario*, les échelles d'ordre 2 et 3 ne permettent pas de déterminer une distribution qui serait indépendante du maillage, comme le souligne la zone grisée à l'extrémité du puits de chaleur. Pour le domaine Ω_p , l'adéquation parfaite des quatre structures k_p est de 40,7%, tandis que celle de Ω_0 pour k_0 est de 51,2%. Le domaine complet Ω est caractérisé au final par une adéquation structurelle de 47,0% entre les quatre solutions, ce qui conforte l'idée d'une dépendance au maillage en dehors de l'accumulation principale aux abords du puits de chaleur.

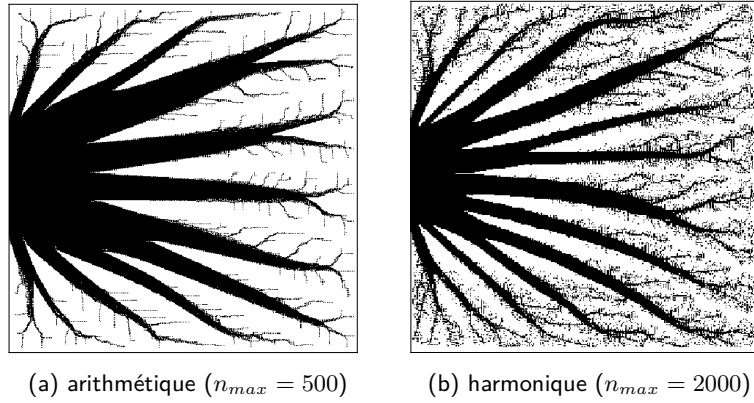
La table de la figure 3.6 détaille l'évolution des pseudo-fonctions objectifs R et A en fonction du nombre d'automates cellulaires impliqués dans le calcul. Plus leur nombre augmente, plus celles-ci diminuent, dans des proportions de l'ordre de 10% pour leurs valeurs extrêmes. Cette diminution peut être attribuée à deux phénomènes, puisque l'augmentation du nombre d'éléments conduit à :

- une discrétisation de l'EDP plus précise, du fait de l'augmentation du nombre de volumes de contrôle, et donc à une évaluation plus juste du champ de température sur lequel reposent les estimations de R et A ,
- un niveau de détails structurels plus importants, qui est donc plus susceptible de développer davantage de petites échelles afin de capter efficacement le flux de chaleur.

La conjonction de ces deux processus rend leur rôle respectif difficilement identifiable. Cependant, en adoptant la démarche détaillée dans la section 4.5.2.1, il est possible de montrer que la diminution de R et A est due en majeure partie à la plus grande finesse structurelle développée par les solutions composées d'un nombre important d'automates. De plus, la table de la figure 3.6 présente également le temps CPU des différents calculs, qui augmente en fonction de la taille du maillage, sur un processeur Intel 64 bits cadencé à 2,5 GHz.

Rôle du filtre numérique. Le second paramètre numérique examiné est relatif au schéma utilisé pour évaluer la conductivité thermique aux interfaces des volumes de contrôle. Les figures 3.7a et 3.7b présentent les résultats obtenus à partir des équations (3.3) et (3.4), c'est-à-dire pour un filtre soit arithmétique, soit harmonique. Structurellement, deux différences majeures apparaissent pour la structure issue du filtrage harmonique : les dendrites d'ordre 1 sont plus fines et plus nombreuses et les ramifications d'ordre 2 et 3 sont quasiment absentes. Celles-ci sont majoritairement remplacées par un enchevêtrement déstructuré de matériaux k_0 ou k_p , formant des damiers discontinus. De plus, le filtrage harmonique est particulièrement difficile à faire converger structurellement, le nombre maximum d'itérations requis pour obtenir une structure stable étant de $n_{max} = 2000$ approximativement. Ces difficultés s'expliquent par le caractère minorant du filtre harmonique : en suivant sa définition et pour une interface bi-matériau k_0/k_p avec $k_0 \ll k_p$, la valeur filtrée $\tilde{k} \rightarrow k_0$. Par conséquent, le filtre harmonique minimise l'impact du matériau hautement conducteur aux limites de son domaine. Le gradient de température en périphérie des éléments k_p isolés est donc moindre, rendant difficile le processus d'identification et d'agglomération de la matière.

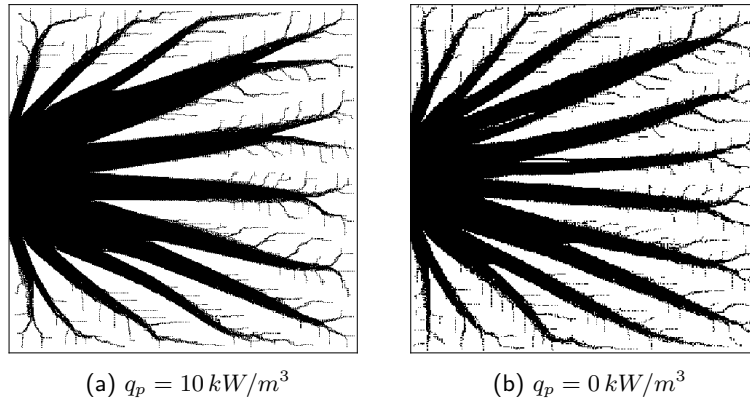
Le tableau présenté sur la figure 3.7 présente les résultats numériques pour chacune des structures. Comme souligné par Gersborg-Hansen *et al.* [59], la comparaison quantitative entre ces deux types de filtre est délicate, puisqu'ils conduisent à des champs de température différents à partir de la même structure. De plus, la forte discontinuité de la structure 3.7b, qui est majoritairement constituée d'un important *checkerboard* structurel, influence de façon significative le résultat numérique. Cette distribution particulière de la matière est étudiée dans la section 3.1.4 et nécessite des précautions supplémentaires pour s'en préserver.



| filtre | $R (\times 10^{-2})$ | $A (\times 10^{-3})$ |
|--------------|----------------------|----------------------|
| arithmétique | 1,55 | 9,70 |
| harmonique | 1,95 | 11,9 |

(c) Comparaison des performances.

FIGURE 3.7 – Influence du filtre numérique utilisé pour établir la conductivité thermique \tilde{k} : 400×400 mailles, $\phi = 40\%$, $\hat{k} = 100$, $q_0 = q_p = 10 \text{ kW}/m^3$.



| génération de chaleur | $R (\times 10^{-2})$ | $A (\times 10^{-3})$ |
|---------------------------|----------------------|----------------------|
| $q_p = 10 \text{ kW}/m^3$ | 1,55 | 9,70 |
| $q_p = 0 \text{ kW}/m^3$ | 1,11 | 6,56 |

(c) Comparaison des performances.

FIGURE 3.8 – Influence du taux de génération de chaleur q_p au sein du matériau hautement conducteur : filtre arithmétique, 400×400 mailles, $\phi = 40\%$, $\hat{k} = 100$, $q_0 = 10 \text{ kW}/m^3$.

Influence du taux de génération de chaleur q_p . D'un point de vue physique, la distribution du matériau hautement conducteur vise à refroidir au mieux l'ensemble du domaine Ω . Si le rôle de Ω_p est de conduire aussi efficacement que possible le flux vers le puits de chaleur, il est plus cohérent que ce sous-domaine ne produise pas de chaleur, c'est-à-dire que $q_p = 0 \text{ kW/m}^3$. Les figures 3.8a et 3.8b comparent deux solutions avec et sans génération de chaleur et présentent toutes deux les mêmes caractéristiques structurelles que celles décrites précédemment. Néanmoins, les structures d'ordre 1 pour $q_p = 0 \text{ kW/m}^3$ présentent une épaisseur légèrement inférieure, ce qui semble raisonnable puisqu'elles véhiculent un flux de chaleur d'une intensité moindre.

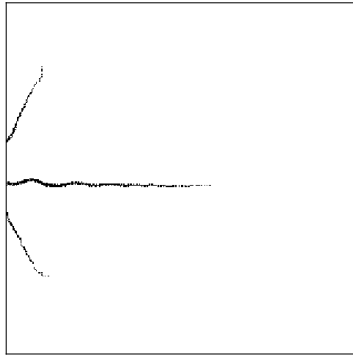
Le tableau présenté sur la figure 3.8a indique que les pseudo-fonctions objectifs R et A sont inférieures sans génération de chaleur au sein de Ω_p , ce qui est en accord avec le sens physique de la configuration étudiée. En définitive, la génération ou non de chaleur dans k_p n'affecte pas outre mesure les structures solutions, en dépit de son impact sur le champ de température, rejoignant les observations effectuées dans la section 4.5.2.4. Plus généralement, cette remarque confirme que la problématique des configurations dites « *volume-to-point* » est faiblement affectée par la génération ou non de chaleur du matériau k_p , comme discuté dans le chapitre précédent.

Variation de la porosité ϕ . Jusqu'à ce point, les structures étudiées ont été évaluées avec une porosité globale de $\phi = 40\%$, en raison du niveau important de détails observables sur ce type de configuration. La figure 3.9 examine l'influence de la variation de ϕ pour 80 valeurs différentes, variant entre 0,5 % et 40 %. L'observation des structures présentées sur la figure 3.9 (a à i) souligne l'inspiration biologique de l'algorithme discuté ici, tant le parallèle possible avec des structures naturelles telles que les racines est clairement mis en lumière. Physiquement, la première observation porte sur la non-symétrie des structures à faible porosité ($\phi \leq 15\%$), alors que le problème abordé l'est parfaitement. En observant la dynamique de convergence de ces structures, il apparaît que la quantité de matière k_p y est trop faible, leur laissant trop de degrés de liberté : elles sont donc libres d'osciller indéfiniment à travers le domaine, pour les raisons explicitées dans la section 3.1.2.1. La réduction du taux de permutation α les fige progressivement dans ce mouvement de balancier, indépendamment de leur caractère symétrique ou non.

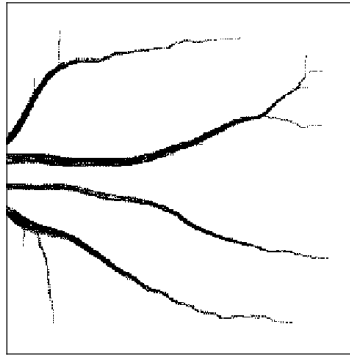
A très faible porosité, pour $\phi \leq 5\%$, l'algorithme atteint des configurations radicalement différentes : celles-ci peuvent se composer de deux à quatre ramifications s'établissant à partir du puits de chaleur, tel que présenté figures 3.9a et 3.9b. Plusieurs calculs avec des porosités égales peuvent atteindre des distributions dissemblables, la topologie finale étant majoritairement influencée par la distribution aléatoire initiale de Ω_p . S'il était possible de concevoir le problème en terme d'optimisation, l'algorithme serait donc incapable d'éviter les optima locaux pour de faibles porosités. Par ailleurs, quelques structures telles que 3.9c et 3.9g présentent des discontinuités internes, certaines dendrites principales étant scindées en leur centre. Ce comportement corrobore l'idée que l'attraction locale de matière n'est pas une méthode exempte de problèmes de convergence.

Les courbes 3.9j et 3.9k présentent l'évolution des paramètres R et A en fonction de la porosité globale. La première courbe est à mettre en parallèle des résultats présentés à la fin du chapitre précédent, et plus particulièrement de la figure 2.10a. Comme précédemment, l'ajout de matériau hautement conducteur k_p dans la structure engendre une forte décroissance initiale des pseudo-fonctions objectif, avant de devenir de plus en plus inefficace.

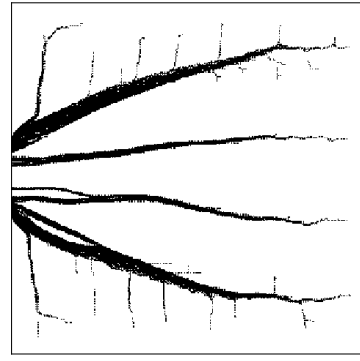
Influence du ratio $\hat{k} = k_p/k_0$. A l'instar de ϕ , des simulations ont été réalisées pour $\hat{k} = k_p/k_0$ variant entre 2 et 400, en maintenant la porosité ϕ à 40 %. Les figures de 3.10a à 3.10i présentent les solutions obtenues et révèlent d'étonnantes variations structurelles. Plus \hat{k} est faible, plus le sous-domaine Ω_p est regroupé autour du puits de chaleur, les structures du premier ordre faisant quasiment défaut tant le matériau est compacté. Pour $\hat{k} \leq 30$, cette caractéristique est également



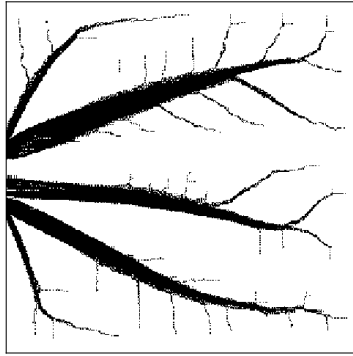
(a) $\phi = 0.5\%$



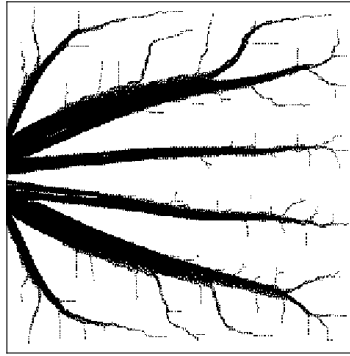
(b) $\phi = 5.0\%$



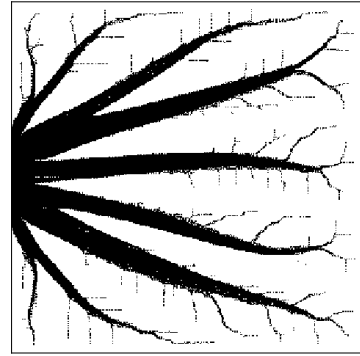
(c) $\phi = 10\%$



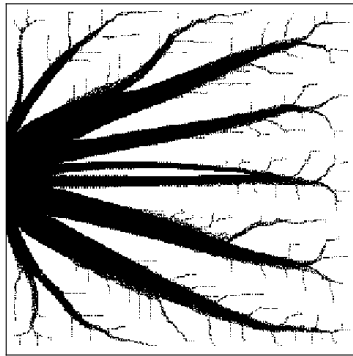
(d) $\phi = 15\%$



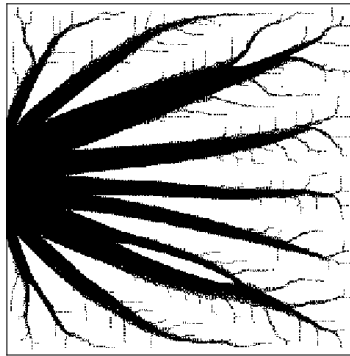
(e) $\phi = 20\%$



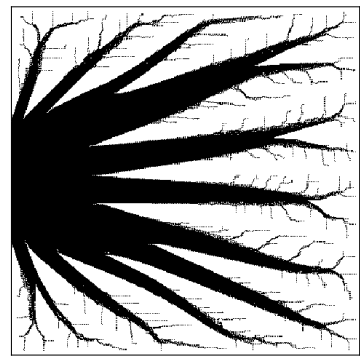
(f) $\phi = 25\%$



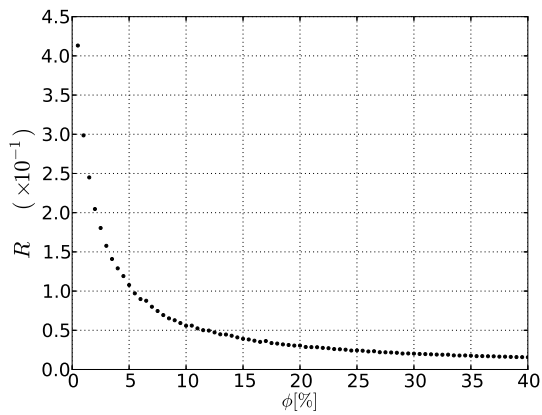
(g) $\phi = 30\%$



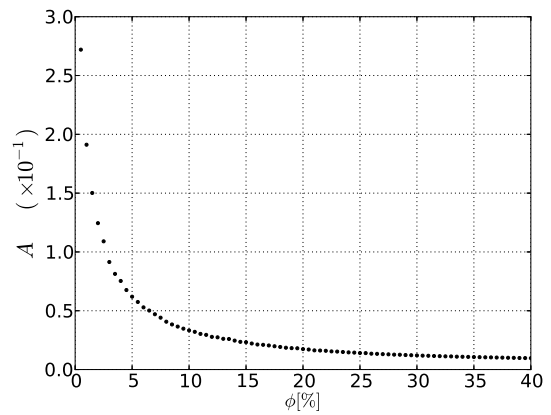
(h) $\phi = 35\%$



(i) $\phi = 40\%$

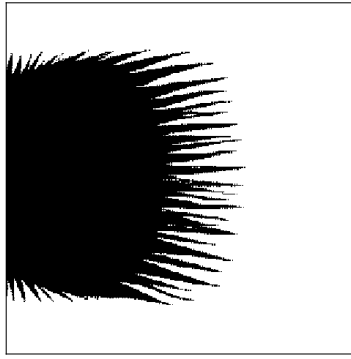


(j) Résistance thermique adimensionnée R

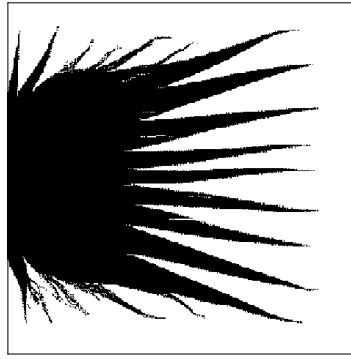


(k) Température moyenne adimensionnée A

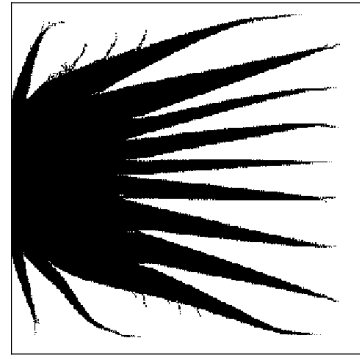
FIGURE 3.9 – Influence de la porosité maximale ϕ variant entre 0, 5% et 40% sur la structure finale : 400×400 mailles, filtre arithmétique, $\hat{k} = 100$, $q_0 = q_p = 10 \text{ kW/m}^3$.



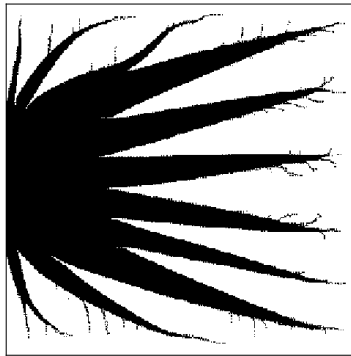
(a) $\hat{k} = 2$



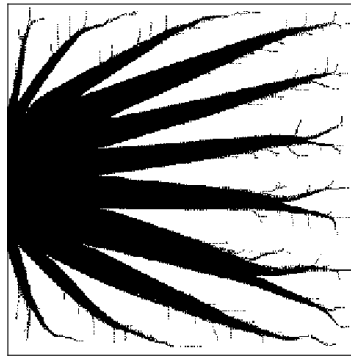
(b) $\hat{k} = 8$



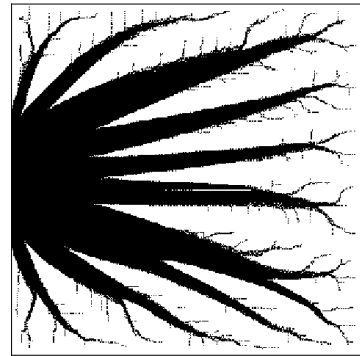
(c) $\hat{k} = 16$



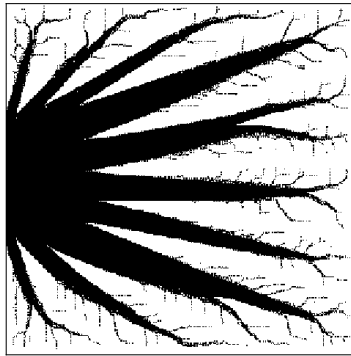
(d) $\hat{k} = 30$



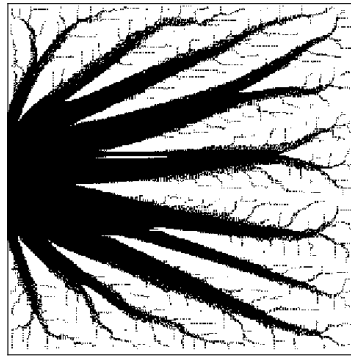
(e) $\hat{k} = 50$



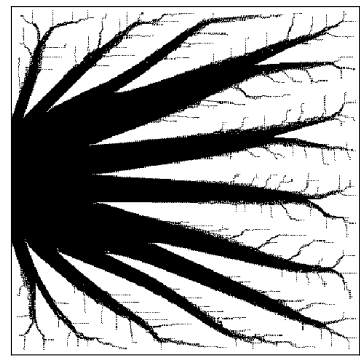
(f) $\hat{k} = 80$



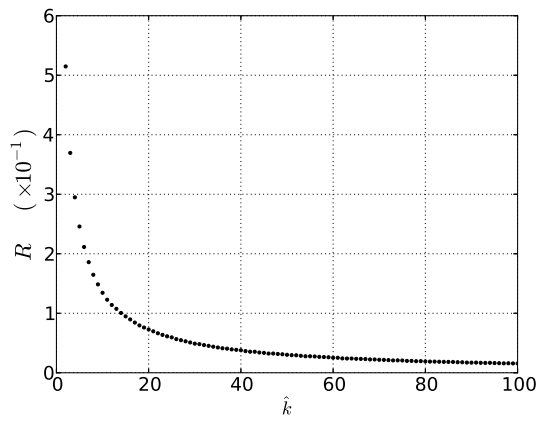
(g) $\hat{k} = 100$



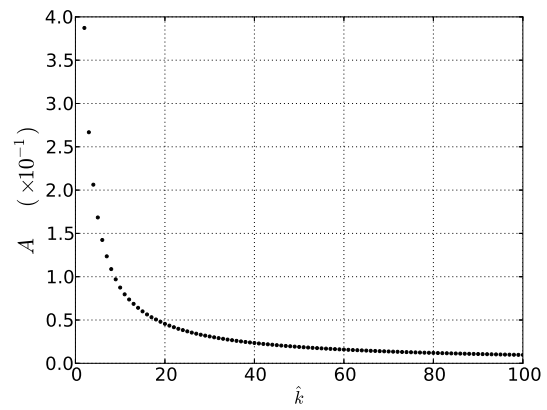
(h) $\hat{k} = 200$



(i) $\hat{k} = 400$



(j) Résistance thermique adimensionnalisée R



(k) Température moyenne adimensionnalisée A

FIGURE 3.10 – Influence du rapport de conductivité \hat{k} variant entre 2 et 400 sur la structure finale : 400×400 mailles, filtre arithmétique, $\bar{\phi} = 40\%$, $q_0 = q_p = 10 \text{ kW/m}^3$.

observable pour les structures de second et de troisième ordre, les dendrites principales étant vierges de toute excroissance. Par la suite, il apparaît clairement que le développement des échelles du second ordre, puis du troisième ordre, prend de l'ampleur avec l'augmentation de \hat{k} . Ce comportement est physiquement cohérent : plus k_p est élevé, moins le matériau conducteur est susceptible d'opposer une résistance lors de la conduction du flux de chaleur. Dès lors, celui-ci est capable d'aller au plus près des zones chaudes pour connecter dans l'idéal chaque élément de Ω_0 au puits de chaleur, en développant une structure hautement ramifiée.

Les courbes 3.10j et 3.10k présentent l'évolution de R et A , pour \hat{k} variant de 2 à 100. Elles soulignent toutes deux que les performances thermiques de la structure augmentent en concordance avec l'augmentation de ratio de conductivité thermique, en accord avec le sens physique de la configuration. Tout comme pour la porosité ϕ , les diminutions de R et A s'effectuent très rapidement dès les premières valeurs de \hat{k} , avant d'avoir un impact beaucoup plus limité par la suite. Ce comportement, associé aux différences structurelles majeures notifiées ci-dessus, laisse à penser que le ratio de conductivité joue un rôle prépondérant dans la forme de la structure solution. Cette remarque rejoint donc l'idée de la théorie constructale qui place la valeur de \hat{k} au centre de son processus décisionnel.

3.1.4 Limitations

L'analyse de l'influence des paramètres numériques et physiques, outre les modifications structurelles qu'elles engendrent, permet d'identifier des limites inhérentes à la méthode : l'absence de symétrie des solutions, alors même que le problème l'est parfaitement, en est une. Cette section examine en détail le problème de la discontinuité du sous-ensemble Ω_p , qui n'a pas de justification physique au regard de la problématique, et tente d'y apporter une réponse.

3.1.4.1 Discontinuité du domaine hautement conducteur

La figure 3.11 présente en détail les échelles d'ordres 2 et 3 d'une solution obtenue pour $\phi = 40\%$. Cette topologie est établie à l'aide d'un filtrage arithmétique, qui minimise la formation des discontinuités entre les deux sous-domaines par rapport à la filtrage harmonique. Les trois agrandissements permettent tout de même de constater deux phénomènes :

- les structures d'ordre 3, dont la largeur excède rarement celle d'une cellule, sont composées en réalité d'une rangée d'automates cellulaires appartenant successivement à Ω_0 et Ω_p . Ce comportement est particulièrement explicite pour l'élargissement le plus éloigné du puits de chaleur ;
- les structures d'ordre 2, dont la section fait intervenir une dizaine d'automates cellulaires, sont poreuses globalement. En d'autres termes, la région délimitée par le matériau k_p est « parsemée » par du matériau k_0 , notamment dans sa zone périphérique.

Ces deux particularités sont connues dans la littérature scientifique sous la dénomination générale de « *checkerboard* », qui caractérise l'alternance spatiale d'un scalaire sur un maillage entre deux valeurs extrêmes, formant un damier en deux dimensions par exemple. Du fait du processus de discrétisation, cette alternance est en général gommée par les filtres aux interfaces des volumes de contrôle, conduisant à une solution numérique qui ne traduit pas la physique réelle des problèmes étudiés.

La principale conséquence du *checkerboard* k_p/k_0 est de maximiser, ou d'étendre artificiellement la zone d'influence du sous-domaine Ω_p . En effet, une zone présentant un *checkerboard* peut être considérée comme étant constituée d'un troisième matériau conducteur dont la conductivité thermique est celle du filtre numérique \tilde{k} . Dès lors, bien qu'appartenant en général à $\partial\Omega_0$ et $\partial\Omega_p$ du fait de leur topologie, le flux de chaleur véhiculé par de telles zones est relativement homogène et

sa norme se situe dans un intervalle éloigné des valeurs extrêmes, l'évinçant de toute possibilité de sélection en vue d'une permutation.

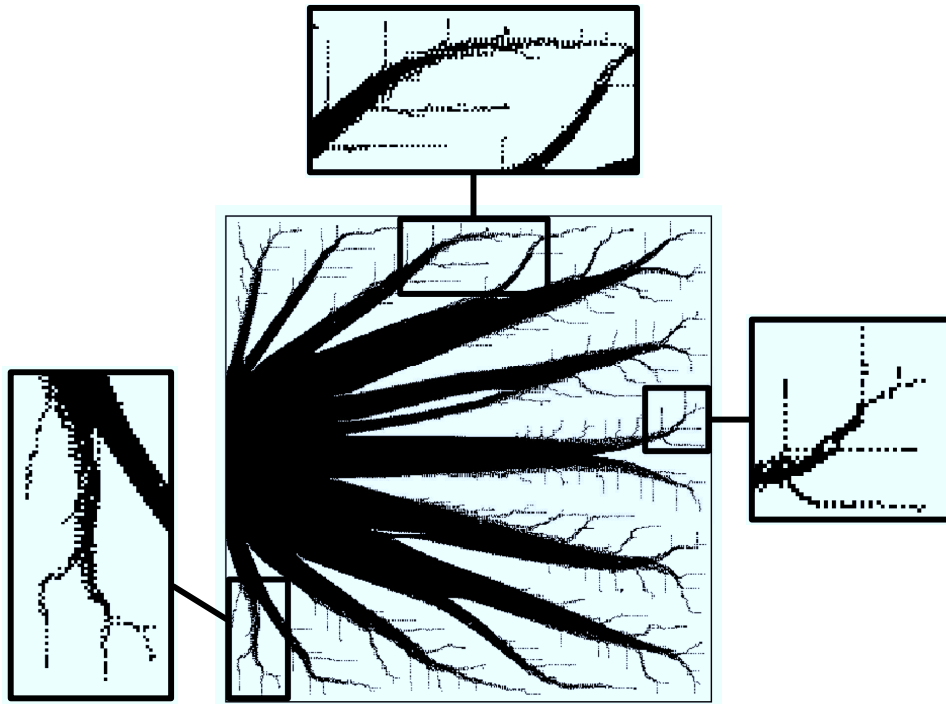


FIGURE 3.11 – Mise en exergue de la problématique des *checkerboards* pour la méthode des automates cellulaires.

3.1.4.2 Dissociation des automates cellulaires et des volumes finis

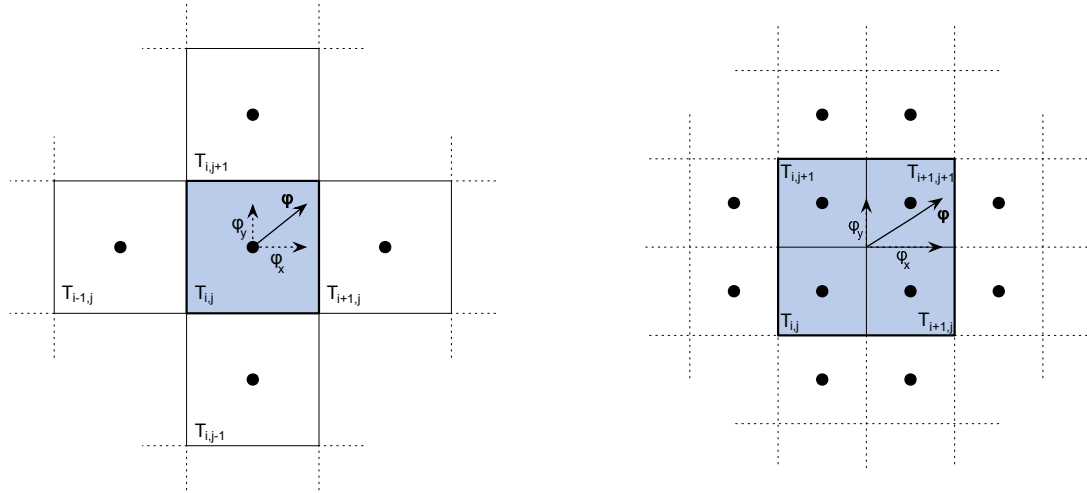
Cette section propose une méthodologie visant à réduire la formation des *checkerboards*, sur la base des remarques formulées précédemment. Celle-ci repose sur la dissociation des volumes de contrôle utilisée dans la discrétisation de l'équation de la chaleur et des automates cellulaires, afin d'évaluer plus précisément le flux de chaleur convoyé par ces derniers. L'idée est qu'un automate cellulaire est désormais recouvert par quatre volumes de contrôle de température, de sorte que l'évaluation du gradient de température en son sein soit plus précise.

La figure 3.12 schématise les deux types d'évaluations possibles du flux de chaleur, en fonction de la taille relative de l'automate cellulaire par rapport à celle des volumes de contrôle. Dans les deux cas, le critère de sélection pour la permutation est :

$$|\varphi_a| = k_a \sqrt{\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)^2} \quad (3.11)$$

où φ_a est le flux de chaleur traversant l'automate cellulaire et k_a sa conductivité thermique. La figure 3.12a présente la stratégie d'évaluation de ∇T introduite par Boichot *et al.* [52], lorsque chaque automate cellulaire coïncide parfaitement avec un volume de contrôle. La discrétisation des dérivées partielles de T avec un schéma centré d'ordre deux est :

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T_{i+1,j} - T_{i-1,j}}{2\Delta x} \\ \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j-1}}{2\Delta y} \end{cases} \quad (3.12)$$



(a) Evaluation du critère de permutation selon Boichot *et al.* [52], dit *critère externe*. (b) Proposition d'un nouveau critère de permutation, dit *critère interne* à l'automate cellulaire.

LEGENDE

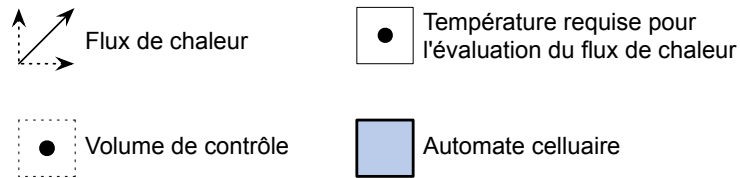


FIGURE 3.12 – Schématisation de deux critères de permutation des matériaux k_0 et k_p s'appuyant sur des scalaires de température situés respectivement à l'extérieur ou à l'intérieur d'un automate cellulaire (en gris).

La substitution de ces deux expressions dans l'équation (3.11) conduit à l'équation (3.5). La conséquence directe de cette stratégie est que toutes les températures impliquées dans l'évaluation du critère de permutation se situent à l'extérieur de l'automate cellulaire concerné, le critère est donc dit *externe*.

A contrario, la figure 3.12b illustre la configuration où les maillages sont dissociés. Le flux de chaleur central peut être évalué en appliquant un schéma centré du premier ordre à ∇T :

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{1}{2} \left(\frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{\Delta x} + \frac{T_{i+1,j+1} - T_{i,j+1}}{\Delta x} \right) \\ \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{1}{2} \left(\frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{\Delta y} + \frac{T_{i+1,j+1} - T_{i+1,j}}{\Delta y} \right) \end{cases} \quad (3.13)$$

où chaque gradient de température est ensuite interpolé linéairement pour le situer au centre de l'automate cellulaire. Cette méthode fait intervenir les quatre volumes de contrôle se situant à l'intérieur de l'automate cellulaire, le critère final est donc dit *interne*. L'avantage majeur de cette approche est qu'elle rend totalement inefficace la formation de *checkerboard*, puisque le flux de chaleur est toujours évalué à matériau constant. La problématique du filtrage de \tilde{k} aux interfaces existe toujours, mais son impact sur le champ de température est atténué puisqu'il intervient proportionnellement moins dans le cas du critère interne que dans celui du critère externe.

La figure 3.13 juxtapose les résultats obtenus avec les critères internes et externes, pour les deux filtrages numériques disponibles. Le critère interne, par sa nature, nécessite de réduire la résolution des structures à 200×200 automates cellulaires de manière à conserver un temps de calcul inférieur à 12h CPU. Les résultats sont structurellement très similaires dans le cas du filtre arithmétique (figures 3.13a et 3.13c), à l'exception des *checkerboards* des échelles d'ordre 2 et 3 qui ont été éliminées par l'utilisation du critère interne. En revanche, la conjonction du filtre harmonique et du critère interne (figure 3.13d) engendre une solution relativement éloignée de tout ce qui a pu être observé jusqu'à ce stade. Sans présenter explicitement de *checkerboard* comme sur la figure 3.13c, (filtre harmonique, critère externe), de nombreuses discontinuités sont présentes au sein des dendrites de premier ordre, leur conférant un aspect filandreux. De plus, celles-ci perdent leur aspect régulier, leur frontière se composant d'une succession de proéminences dont s'échappent parfois une sous-structure d'ordre 3.

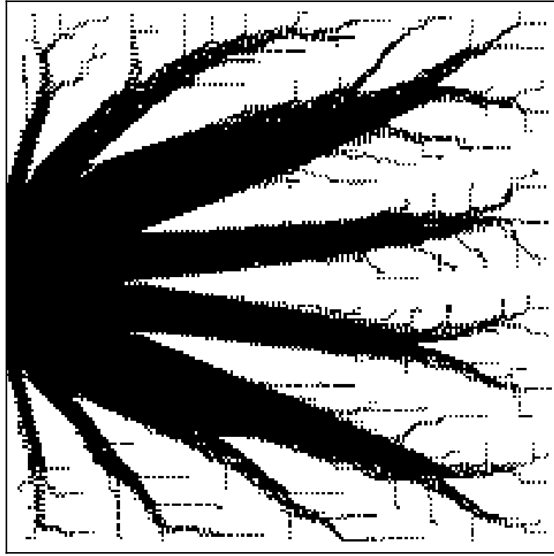
Il faut tout de même noter que les problèmes de convergence obligeant à utiliser un nombre maximum d'itérations élevé avec un filtre harmonique et un critère externe ($n_{max} = 2000$ correspondant à 48h de temps calcul CPU) disparaissent lors de l'utilisation du critère interne, rejoignant ainsi le comportement explicité dans la section 3.1.3.1. De plus, l'analyse des performances présentée dans la tableau sous la figure 3.13 souffre du même biais que celui mentionné dans le cadre de la section portant sur les filtres numériques. Par exemple, dans le cas du filtre arithmétique, la structure atteinte à partir du critère interne affiche des valeurs de R et A plus élevées que celles s'appuyant sur le critère externe, quand bien même les solutions sont structurellement similaires. Cette augmentation doit donc être attribuée à une évaluation numérique plus juste du champ de température, et non pas à une détérioration de la structure. Inversement, la destruction des *checkerboards* de la figure 3.13c conduit à une amélioration des performances de la structure 3.13d. Des calculs supplémentaires seraient nécessaire pour connaître la fraction de cette diminution qui est effectivement attribuable au changement de topologie, et la fraction qui est issue d'une évaluation numérique plus juste, en dissociant par exemple davantage les automates cellulaires du maillage. Cependant, avant de s'engager dans cette quantification, il conviendrait d'améliorer l'algorithme général afin d'obtenir des structures symétriques et dont les résultats issus des filtres arithmétiques et harmoniques s'accordent.

3.1.5 Comparaison avec la théorie constructale

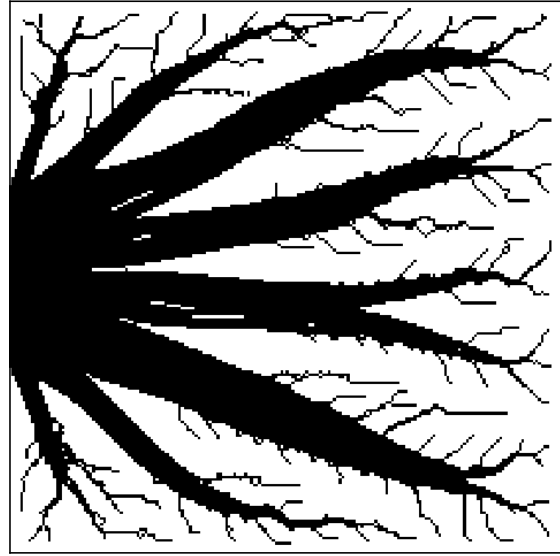
Etant donné le caractère multi-échelle des solutions obtenues par le biais des automates cellulaires, une comparaison avec l'approche constructale s'impose, dans la continuité des travaux de Boichot *et al.* [52]. Comme explicité au fil du chapitre 2, la forme finale des structures constructales est entièrement déterminée par les caractéristiques physiques du volume élémentaire. Une comparaison avec l'approche développée dans cette section nécessite donc de sélectionner une ou plusieurs structures représentatives de la théorie constructale, afin de confronter leurs performances sur la base de géométries comparables : dimensions externes et largeur du puits de chaleur.

Les deux géométries servant de référence pour la théorie constructale ont été sélectionnées sur la base de deux constats :

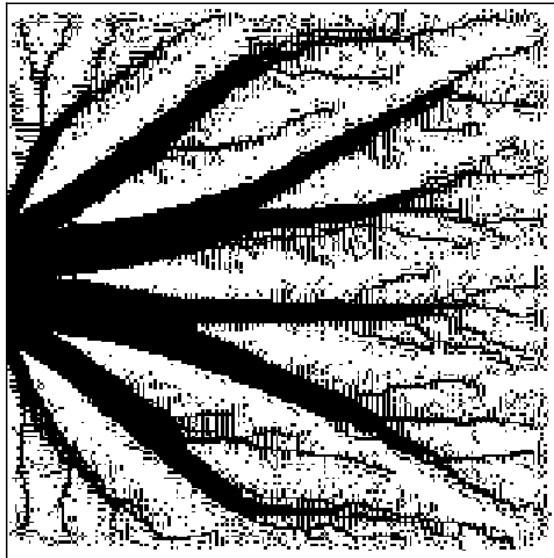
- Le principal résultat du chapitre précédent, en accord avec [89, 102], montre que, au-delà du premier niveau constructal, l'accroissement de complexité de la structure ne conduit pas à la diminution de la résistance thermique adimensionnée R . Ghodoossi [105] a également démontré que la diminution du taux de production d'entropie n'était pas affectée au-delà de ce niveau.
- En 2007, Kuddusi et Denton [104] ont développé une formulation très aboutie de la théorie constructale pour un volume fini générant de la chaleur, mais sans production au sein du matériau hautement conducteur ($q_p = 0 \text{ kW/m}^3$). Leur formulation ne repose sur aucune prédominance de direction pour le flux de chaleur et constitue en cela l'approche la plus précise formulée à ce jour.



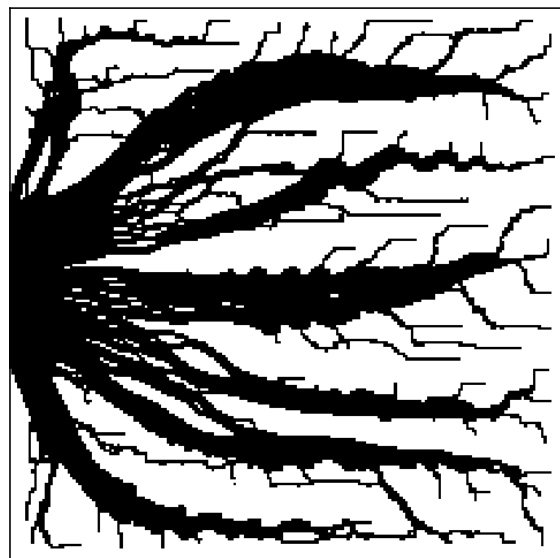
(a) critère externe, filtre arithmétique, $n_{max} = 500$



(b) critère interne, filtre arithmétique, $n_{max} = 500$



(c) critère externe, filtre harmonique, $n_{max} = 2000$



(d) critère interne, filtre harmonique, $n_{max} = 500$

| filtre | critère | $R (\times 10^{-2})$ | $A (\times 10^{-3})$ |
|--------------|---------|----------------------|----------------------|
| arithmétique | externe | 1,59 | 9,93 |
| | interne | 1,63 | 10,2 |
| harmonique | externe | 2,30 | 13,4 |
| | interne | 1,74 | 11,1 |

(e) Comparaison des performances.

FIGURE 3.13 – Comparaison de l'influence du critère de permutation interne ou externe : 200×200 automates cellulaires, volumes de contrôle 200×200 (externe) et 400×400 (interne), $\bar{\phi} = 40\%$, $\hat{k} = 100$, $q_0 = q_p = 10 \text{ kW/m}^3$.

La combinaison de ces deux remarques conduit à la sélection de deux structures constructales d'ordre 1, à partir des corrélations obtenues par Kuddusi et Denton [104]. Les deux constructions du premier ordre sont respectivement constituées de six et huit volumes élémentaires, de sorte à obtenir une porosité globale dans un intervalle acceptable ($5\% \leq \phi \leq 25\%$), comme représenté sur les figures 3.14a et 3.14b. Le processus de construction est effectué à l'envers par rapport à la théorie classique [83], en calculant *a posteriori* quelle porosité initiale du volume élémentaire ϕ_0 permet d'obtenir un nombre entier de volumes élémentaires, de façon similaire à la section 2.5.3.

Kuddusi et Denton [104] explicitent le lien entre le nombre de volumes élémentaires n_1 et les différents paramètres d'ordre 0 et 1 du volume fini :

$$n_{1,opt} = 2\sqrt{\frac{2\hat{k}(\phi_1 - \phi_{0,opt})R_{0,min}}{r_{0,opt}}} \quad (3.14)$$

où des corrélations précises décrivent le comportement de $R_{0,min}$ and $r_{0,opt}$ en fonction du produit $\hat{k}\phi_{0,opt}$. Pour un ratio de conductivité $\hat{k} = 400$, ces corrélations sont [104] :

$$R_{0,min} = -0,0355 \ln(\hat{k}\phi_{0,opt}) + 0,1946 \quad (3.15)$$

$$r_{0,opt} = 1,5443 (\hat{k}\phi_{0,opt})^{-0,4060} \quad (3.16)$$

Le lien entre le volume de premier ordre et les volumes élémentaires le constituant est effectué en optimisant ϕ_1 par rapport à ϕ_0 , ce qui conduit à la corrélation suivante pour $\hat{k} = 400$ [104] :

$$\phi_{0,opt} = 0,7711\phi_1^{1,2654} \quad (3.17)$$

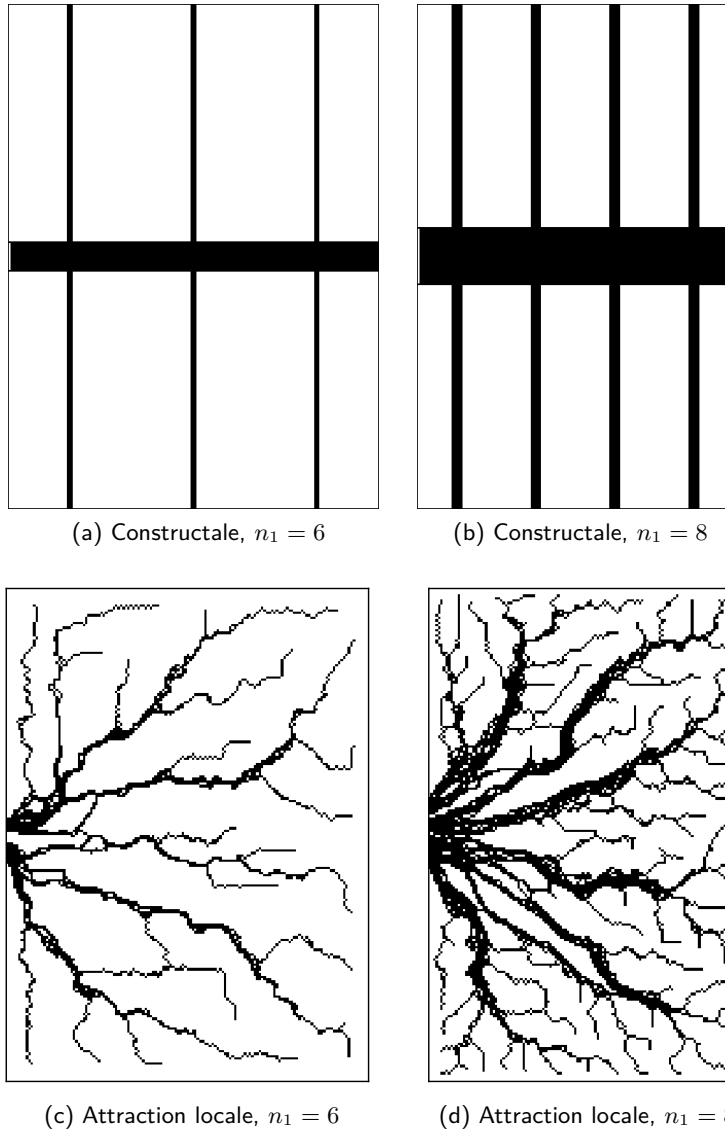
L'inclusion des équations (3.15), (3.16) et (3.17) dans l'équation (3.14) conduit finalement à :

$$\begin{aligned} n_{1,opt}^2 = & [-1028,72 \ln(400\phi_{0,opt}) + 5639,10] \phi_{0,opt}^{1,1963} \\ & + [837,69 \ln(400\phi_{0,opt}) - 4591,95] \phi_{0,opt}^{1,4060} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Cette équation est résolue numériquement afin de déterminer $\phi_{0,opt}$ pour $n_{1,opt} = 6$ et 8, conduisant respectivement à 4,23% et 12,78%. Une fois les géométries réelles construites (figures 3.14a et 3.14b), un calcul direct, et exempté des approximations mentionnées dans la section 2.4.2, permet de déterminer que leur porosité globale est $\phi = 9,83\%$ and $22,71\%$. Les comparaisons établies par la suite avec les autres méthodes s'appuient essentiellement sur ces deux valeurs.

Les dimensions externes (L et H), la largeur du puits de chaleur (D) et la porosité globale (ϕ) de chaque structure sont indiquées dans la tableau sous la figure 3.14. Suivant les observations faites dans les sections précédentes, les automates cellulaires s'appuient sur un critère interne et un filtre arithmétique, c'est-à-dire sur la combinaison qui a la plus grande capacité à générer des structures continues. Une fois les solutions établies à partir de chaque méthode, ses performances thermiques sont évaluées à l'aide du code commercial FLUENT, utilisé dans les mêmes conditions que celles décrites dans la section 2.5.4. En particulier, le maillage a été réalisé attentivement afin de respecter le critère portant sur le nombre minimum de volumes de contrôle décrivant les échelles inférieures, conduisant à des structures composées d'environ 500 000 mailles triangulaires.

Les figures 3.14c et 3.14d présentent les structures obtenues en dessous de leurs solutions constructales respectives. Les résultats provenant des automates cellulaires sont structurellement très différents et présentent un nombre très important de ramifications. La table 3.14 indique la valeur des pseudos-fonctions R et A évaluées à partir du solveur intégré à l'algorithme, et donc sur les bases



| n_1 | ϕ | H <i>mm</i> | L <i>mm</i> | D <i>mm</i> | Optimisation | Solveur | $R (\times 10^{-3})$ | $A (\times 10^{-3})$ |
|-------|--------|------------------|------------------|------------------|-------------------|---------|----------------------|----------------------|
| - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 6 | 9,83% | 100 | 73,50 | 5,85 | constructale | FLUENT | 30,1 | 17,3 |
| | | | | | attraction locale | FLUENT | 44,5 | 20,6 |
| | | | | | | intégré | 22,7 | 13,5 |
| 8 | 22,71% | 100 | 62,53 | 11,38 | constructale | FLUENT | 11,5 | 6,41 |
| | | | | | attraction locale | FLUENT | 12,2 | 5,98 |
| | | | | | | intégré | 7,13 | 4,22 |

(e) Comparaison des performances.

FIGURE 3.14 – Comparaison des structures constructales avec les automates cellulaires basés sur des critères de permutation interne : filtre arithmétique, $\hat{k} = 400$, $q_p = 0 \text{ kW/m}^3$ et $q_0 = 10 \text{ kW/m}^3$.

d'un maillage relativement grossier, et à partir de FLUENT et d'un maillage beaucoup plus fin. La première remarque porte sur la différence majeure entre les valeurs des pseudo-fonctions objectifs pour une structure donnée, en fonction de leur mode d'évaluation. Pour $n_1 = 6$, R est quasiment deux fois plus important lorsque la performance est quantifiée à partir d'un maillage fin. Pour $n_1 = 8$, et donc pour une valeur plus importante de la porosité ϕ , cette différence s'amenuise considérablement. La raison principale de cette discordance repose sur l'aspect poreux du domaine Ω_p des structures à faible ϕ et à l'incapacité du schéma numérique développé à traduire avec un degré de détails suffisant la topologie réelle du système en raison du nombre trop faible de mailles. Quatre volumes de contrôle de température par automate cellulaire sont insuffisants pour décrire une structure présentant un nombre important d'alternances entre les deux domaines conducteurs.

De fait, une comparaison effective ne peut être menée que en considérant les valeurs obtenues au moyen de FLUENT, afin d'éviter tout biais introduit par des maillages ou des schémas numériques différents. Dans ces conditions, les automates cellulaires ne fournissent un meilleur résultat que dans un seul cas : le critère A de la structure caractérisée par $n_1 = 8$. Comme déjà mentionné, ces mauvaises performances s'expliquent avant tout par les discontinuités au sein du réseau k_p et tendent à disparaître pour des porosités ϕ élevées. Les travaux de Boichot *et al.* [52] confirment ce constat : sur les cinq structures étudiées, celle ayant le degré de performance le moins élevé par rapport à la théorie constructale est celle possédant la plus faible porosité.

3.1.6 Conclusion

Cette première approche des automates cellulaires agencés en s'appuyant sur la norme du flux de chaleur présente deux avantages. D'une part, le mimétisme avec les structures naturelles, bien qu'uniquement appréhendable qualitativement, laisse à penser que la démarche tend spontanément vers un optimum. En considérant que l'évolution des espèces biologiques confrontées aux problèmes dits *volume-to-point*, tel que les espèces arboricoles, ont eu des milliers de générations pour converger vers une structure optimale au sens de leurs besoins, l'étude d'un algorithme y conduisant sur un critère simple semble appropriée. D'autre part, du point de vue de l'optimisation topologique, l'utilisation d'un critère de permutation local rend la convergence de l'algorithme particulièrement rapide, surtout vu le nombre important de paramètres de contrôle impliqués.

Cependant, un désavantage majeur des solutions présentées au fil de cette section porte sur l'asymétrie des topologies. Celle-ci ne trouve aucune justification physique quand à son optimalité et complexifie pratiquement la réalisation des structures. De plus, pour de faibles porosités globales ($\phi \leq 15\%$), les réseaux hautement conducteurs présentent des structures relativement poreuses, c'est-à-dire composées de façon parcellaire avec du matériau k_0 , et même discontinues par endroit, posant de sérieux doutes sur leurs caractères optimaux. L'analyse menée dans le cadre de l'approche constructale confirme cette tendance, suggérant qu'il existerait une porosité globale critique sous laquelle la méthode n'est pas applicable.

Le prochain défi consiste donc à établir un algorithme générant des structures à la fois symétriques et continues, tout en conservant l'approche relative aux automates cellulaires. Pour ce faire, la section suivante propose une méthode inspirée des approches évolutionnistes en mécanique du solide, dites *Evolutionary Structural Optimization*. En inversant sa philosophie initiale afin de laisser croître le domaine Ω_p au sein de Ω , par le biais d'additions successives d'automates cellulaires, il est possible de satisfaire aux critères de continuité. De plus, la démarche s'appuie explicitement sur une fonction objectif, qui est minimisée à chaque itération, dessinant un algorithme plus proche de la définition de l'optimisation au sens mathématique du terme. *A contrario* des automates cellulaires permutant à l'aide d'un critère local, l'implantation des automates y est explicitement guidée par une fonction objectif à satisfaire.

La section suivante est la reproduction d'une communication effectuée dans le cadre de la 7^{ème} *International Conference on Computational Heat and Mass Transfer* [117]. Les notations ont été légèrement adaptées afin de conserver une homogénéité de forme avec celle introduite dans cette section.

3.2 Evolutionary Structural Optimization by extension

The present study tackles the fundamental problem of cooling efficiently a finite-size volume generating heat with high conductivity material. The optimal organization of a finite amount of high conductivity material is still an open question and several different optimization methods put forward solutions leading to different designs. Ranging from constructal theory to morphing by gradient attraction, including metaheuristic methods, these approaches create tree-shaped cooling networks through the finite-size volume. The present work deals with an Evolutionary Structural Optimization (ESO) algorithm, which has been implemented in order to extend the cooling structure instead of degenerating its shape. Parallel calculation abilities have been developed allowing considering global objective functions such as the average temperature, instead of local temperature reductions. In addition to the valuable performances of the geometry reached, the history of construction provides further informations about the high conductivity layout. The results are compared with two geometries coming from constructal approach, under the same physical and geometrical assumptions.

3.2.1 Introduction

Among all the volume-to-point flow problems, one of the most addressed is linked with cooling operation. In [83], a fundamental problem is stated by Bejan as follows:

Consider a finite-size volume in which heat is being generated at every point, and which is cooled through a small patch (heat sink) located on its boundary. A finite amount of high conductivity (k_p) material is available. Determine the optimal distribution of k_p material through the given volume such that the highest temperature is minimized.

Several methods exist to create a high conductivity tree-network inside the finite-size volume, allowing draining heat to the sink. An example of construction method is constructal theory, which has been developed by Bejan in 1997 [83]: its philosophy lies on a process taking place from the smallest scales towards the largest ones. Its development has been partly based on the observation of organization in Nature and aims creating a bridge between physics and biology. However, in the frame of the problem tackled in this work, studies show that constructal theory is not optimal and too restrictive to be applied to real geometries [89, 98].

Another construction approach has been proposed by Xia *et al.* [47] in 2002, who titled it *bionic optimization*. It has been introduced in the frame of a two-dimensional heat conduction model involving a problem similar to [83] and has been followed by Cheng's work (*et al.*) [49]. The bionic principle considers the high conductivity material as being alive: its evolutionary principle involves that the growth is located where the maximum heat flux is. In 2009, Boichot *et al.* [52] used a similar method, named over *morphing by gradient attraction*, to rearrange k_p material from constructal geometries. They conclude their works underlining the unexplored field of cellular automaton applied to heat transfer.

Metaheuristic tools belong to the optimization processes widely applied to a large range of fields. Two specific metaheuristic schemes have been used to optimize the cooling structure made up of high conductivity material: simulated annealing (SA) and single-objective genetic algorithms (GAs). Xu *et al.* carried out SA and GAs implementations [53]: they made a comparison between the geometries

coming from both metaheuristic approaches and other methods such as constructal theory or bionic optimization. In their conclusion, they point out the strong mesh dependency of their solutions.

Evolutionary Structural Optimization (ESO) is another way to shape design problems subjected to steady heat conduction. It has been borrowed to topology optimization in continuum and structural mechanics and Li *et al.* extended its methodology to heat conduction in 1999 [46,50]. ESO principle lies on a discrete design variable method, also called 1 – 0 method. The method is based on changing one of the main physical parameter of the elements constituting the mesh of a finite element or volume method. In the frame of heat conduction, ESO starts from a calculation field entirely made up of high conductivity material and removes it through a step-by-step approach based on a rejection ratio. The process stops when the optimization limits are reached, typically when the amount of k_p material becomes lower than the quantity wished.

The present work follows mainly the ESO philosophy such as it is defined in [46], constructing the cooling tree-network by arranging successively the high conductivity material. However, compared to [50], three differences are introduced allowing considering the problem from a more accurate angle thanks to a massive parallelization of the algorithmic scheme. At first, the sensitivity analysis is performed without making any assumption. Secondly, the traditional degenerative process has been reversed according to the nature of the problem: from now on, the high conductivity material is added to the cooling structure which starts its extension from the heat sink. Thirdly, the implemented objective functions are not restricted to temperature reductions in local points, but they can include global reduction such as average temperature.

First of all, the present study introduces the ESO algorithm by extension, pointing out the efforts made in code parallelization. Next, the influence of continuous k_p material extension is quantified in function of different objective functions. In completing, comparisons are made with results coming from constructal theory [83, 104]. Beyond quantitative aspects, the features of the cooling networks developed within this study possess similarities with the ones developed through the different enhancements of constructal approach [99–101].

3.2.2 Evolutionary Structural Optimization by extension

The physical parameters of the problem are described by Bejan in [83]. The energy differential equation driving the heat flux lies on several assumptions: at first, all the calculations are carried out under steady state conditions, meaning that the whole heat produced by the volume is evacuated through the heat sink. Secondly, material generating heat (k_0) and high conductivity material (k_p) are viewed as homogenous and isotropic, without effect of temperature on their respective conductivity. Throughout this study, it is also assumed that k_p material does not generate heat since it is added to the finite-size volume in order to cool it. Fig. 3.15 shows a classical geometry such as it is established for the calculation process.

3.2.2.1 Problem introduction

Defining q as the heat generation rate, the differential energy balance equation for the finite-size volume is :

$$\nabla \cdot (k \nabla T) + q = 0 \quad \text{with} \quad \begin{cases} k = k_p, & q = 0 & \text{for high conductivity material} \\ k = k_0, & q = q_0 & \text{for material generating heat} \end{cases} \quad (3.19)$$

The proof of Eq. 3.19 is widely available in literature, but [104] fully took it up in their work. In addition, three different boundary conditions are applied to the edges, as detailed in Fig. 3.15. At first, the hatched line pictures a symmetry condition along the x-axis: thanks to the geometry,

calculations can only be run on the upper part, then reflected to the lower one. This condition is similar to the one describing the adiabatic edges, pictured with a black continuous line, and requires that the normal heat flux to each edge is equal to zero. The small black and white rectangle at the bottom left-hand corner pictures the heat sink location, which is characterized thanks to a Dirichlet boundary condition, namely $T(0, y) = T_s$ for $0 \leq y \leq D/2$. Eq. 3.19 is solved thanks to finite volume method (FVM). The two-dimensional geometry is discretized into a finite number of control volumes, also shown in Fig. 3.15. The grid is cartesian and structured, which is perfectly suitable for regular geometry, and the thermal conductivity at cell interfaces is evaluated thanks to an harmonic filter (see Eq. (3.4)).

3.2.2.2 Setting up algorithm

FVM allows evaluating the temperature field for all the possible k_p material configurations. The ESO algorithm rests on this numerical method to allocate high conductivity material, literally constructing the cooling network in a generative way. A sensitivity analysis must be led in order to identify the high conductivity elements to set up, namely the ones which will have a maximum impact on the objective function. The developed algorithm lies on the switch from k_0 to k_p material of only one control volume per iteration step (Fig. 3.16a). An element has to fulfill two requirements to be switched: obviously, it must be made of k_0 material, but it also has to be located on the boundary of the high conductivity structure being built. This second condition insures continuity through k_p material, whatever the shape of the cooling structure. Switching control volumes stops when a fraction ϕ of the whole finite-size volume is reached, called porosity. The construction is performed thanks to two overlapped loops: the main one works on switching elements step by step to reach the wanted porosity, whereas the second one allows calculating the sensitivity of boundary elements (Fig. 3.16b).

This second test loop aims scanning the set of k_0 elements marking the boundary of k_p structure. However, since the calculation starts without high conductivity element, an initial boundary must be established to perform the first permutations. Two factors have oriented this initial choice: on one hand, the continuity assumption leads to connect every control volume made of k_p material to the heat sink. On the other hand, it stands to reason that an accumulation of high conductivity material is predictable around the heat sink as the whole generated heat goes through the region surrounding it. Consequently, the initial boundary shape is implemented along the heat sink, meaning that each control volume being next to it is a candidate for the first material permutation.

The sensitivity analysis along the k_p boundary is led by setting up each element with high-conductivity material and evaluating the objective function in this new configuration. The element

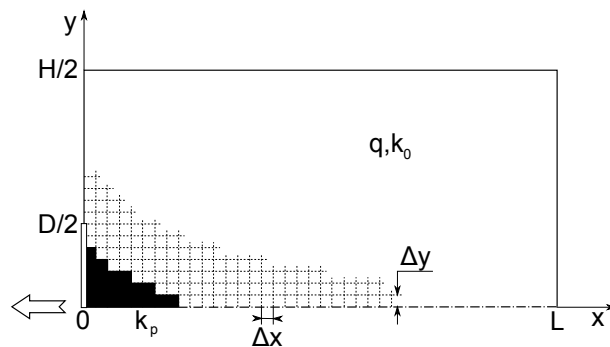


Figure 3.15: Physical and geometrical description of a rectangular finite-size volume including k_p material (in black) and k_0 material (in white) with a structured mesh.

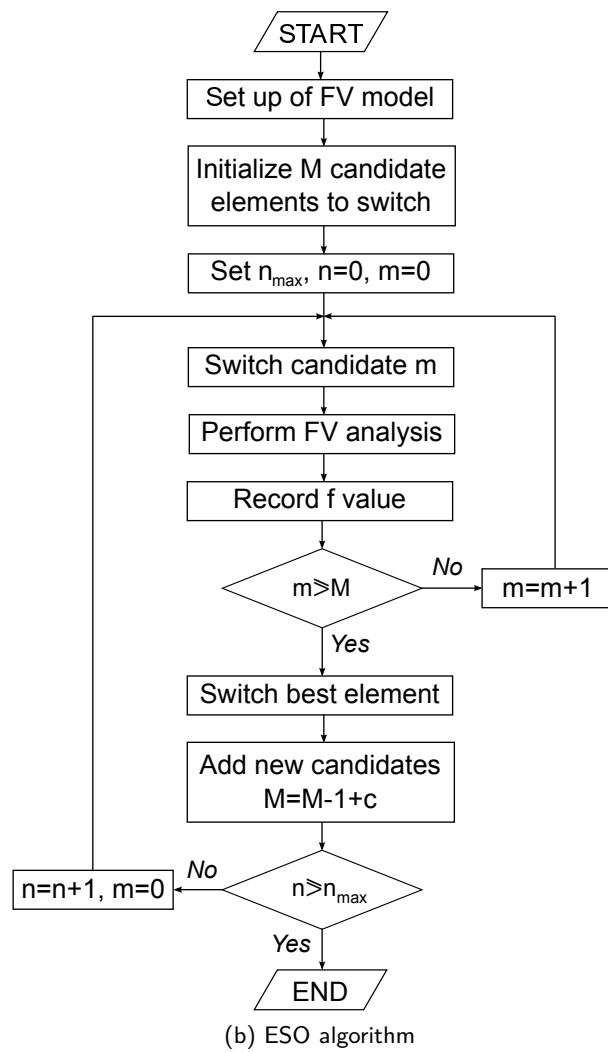
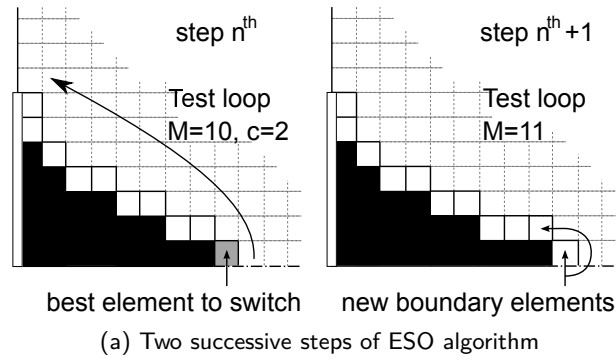


Figure 3.16: Specific ESO algorithm used in the present study.

which has the best impact on it is switched at the end of the main loop (Fig. 3.16a). This strategy leads to a significant problem concerning the calculation time. While a few control volumes are tested at the beginning of the ESO process, the time required by the sensitivity analysis is relatively short. Nonetheless, in conjunction with the structure rise, the number of tested elements becomes increasingly large, as well as the required calculation time. In order to resolve this specific problem, parallelization abilities have been developed, allowing calculating simultaneously different permutations. Concretely, the boundary is divided into the cores dedicated to the calculation. Fig. 3.17 details the parallelization for 4 cores (3 slaves and 1 master) and the determination of the best element.

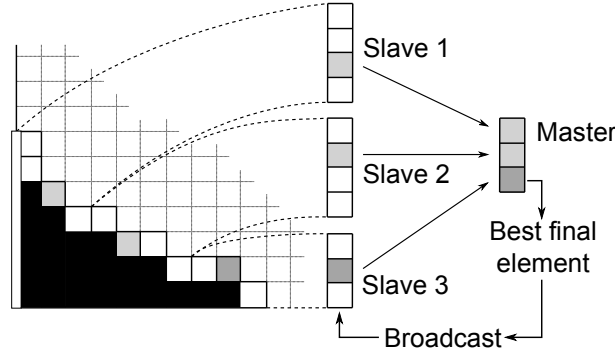


Figure 3.17: Operations of the parallel ESO algorithm on 4 cores (3 slaves and 1 master).

The parallel test loops are performed independently by each slave, determining the best element to switch on their interval. Each best element is sent to the master process which collects all the best values of the objective function and only keeps the most efficient one. Once it has received the j^{th} value coming from the j^{th} slave, it broadcasts its switching decision to everyone before allowing the slaves starting their next test loops. Obviously, the more the slaves are numerous, the more the calculation time is short. As so far, calculations have been run up to 80 slaves providing the results detailed in the next section.

The coupling between FVM and the evolutionary optimization methods is subject to some precautions regarding the independence of the final geometry to the mesh size. Different calculations have been run for the same external geometries with different sizes of cells: independence of the main structure is reached if the cell dimensions are below a critical a size, which has been set at 2.10^5 cells/ m^2 . Even though this observation is correct for the skeleton of the k_p network, it is worth noting that the complexity of the thinnest structures is restricted by this critical value. All the results introduced in next section have been generated under this condition of mesh independence.

3.2.3 Results and discussion

The results are interesting regarding two aspects: the shapes reached thanks to different objective functions and the history of construction. Calculations have been run with a square measuring 100 mm on each side, made of k_0 material with a thermal conductivity of 1 W/m.K and having a heat generation rate $q = 10$ kW/ m^3 . k_p material has a conductivity of 500 W/m.K with a maximal porosity of $\phi = 20\%$, and it is connected to a heat sink measuring 2mm height. For each case after-specified, the grid size is strictly identical and made of 20000 square elements on half-size of the field ($\Delta x = \Delta y = 0.5$ mm).

3.2.3.1 Shape of cooling networks

Two objective functions involving two opposite approaches have been investigated: on one hand, a local temperature is reduced, and on the other hand, the global average temperature is minimized. These two criteria have been chosen to picture the differences inferred by a local or a global objective. The local optimization targets minimizing the temperature of the farthest point from the heat sink, namely the upper right-hand side corner:

$$\min f = T\left(L, \frac{H}{2}\right) - T_s \quad (3.20)$$

The other objective function tries to achieve a minimization of the temperature average, namely:

$$\min f = \frac{2}{HL} \int_0^L \int_0^{H/2} (T - T_s) dx dy \quad (3.21)$$

The reached geometries, shown on Fig. 3.18, have different shapes according of their objective function, as underlined in [50]. k_p material added in order to reduce a local temperature is only dedicated to this task: the cooling network takes the shape of a link between the farthest corner and the heat sink, with a cross section becoming thinner through the finite-size volume. The main consequence of local objectives is that almost the whole field generating heat is left without any high conductivity material, since it only focuses on cooling a single control volume. The global objectives, such as average minimization, do not behave in the same way: k_p material is spread out through the finite-size volume with more spatial coherence. In some way, the cooling structure really tries connecting every control volume with the heat sink, leading to a tree-shaped network covering the whole area.

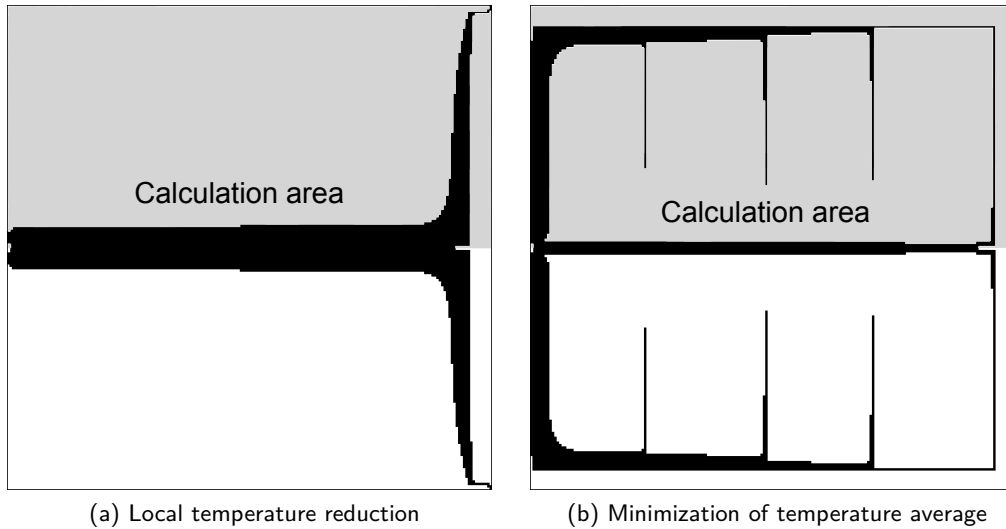


Figure 3.18: Cooling network with a 2mm heat sink and a porosity of $\phi = 15\%$.

Through all the test cases run, the most interesting structures come from the temperature average reduction. These configurations have well-structured networks, especially if manufacturing constraints are taken into account. And secondly, the history of construction shows remarkable features which provide additional information about the way to construct the solution.

3.2.3.2 History of construction

Plotting the objective function values versus the porosity of the structure during the calculation process provides the history of solution construction. Coupling this plot with observations of shape

modifications allows identifying key points during the construction steps. Figures 3.19 and 3.20 show these different states of the k_p material setting up for average objective. A parallel can be drawn between the scales of fractal theory and the way to construct the ESO solution. The present process takes place from the largest scale toward the smallest one, with gentler transitions between each level. The different scales are successively evolved during the process and three of them are distinctly identifiable:

1. From 0% to 7.23%: k_p material surrounds the whole finite-size volume and split it into two parts from the symmetry axis. This step can be seen as the first scale, *i.e.* the largest one.
2. From 7.23% to 15.5%: from the first level structure, six main dendrites (three for each side) are spread through the k_0 material, following the heat sink direction. This additional high conductivity material never intersects itself and builds the second scale.
3. From 15.5% to 20.0%: from the two first scales, smaller extra dendrites are built towards virgin territories. They mainly turn back towards the heat sink and intersections may occur with second level structure.

Fig. 3.20 also emphasizes several discontinuities at regular intervals, which becomes manifest if the derivative function is established. The k_p geometry at each discontinuity is pictured at the top of Fig. 3.20, underlining that each of them matches a key step in the orientation of the extension process. For the first scale between (a) and (f), each discontinuity is linked with a change of direction during the surrounding of k_0 material. The three discontinuities of the second scale, included between (f) and (i), correspond to the establishing of its three dendrites. A similar behaviour is observable for the third construct and the growth of its own dendrites. An interesting phenomenon occurs before the construction of a new dendrite and after the establishing of the previous one: the previous scales are consolidated with additional k_p material. In other words, the creation of a new dendrite draining additional flux is always followed with a strengthening of the main structure.

Another point brought by Fig. 3.20 is relative to the effectiveness of k_p material addition, which becomes less efficient during the construction. For instance, between (i) and (j) almost 25% of the allocated material has been used to decrease the objective function value of only a few tenths of percent. Similar comments about constructal approach applied to this problem have been formulated in [98].

3.2.4 Comparison between ESO and constructal methods

A comparison between a constructal geometry coming from [104] and the ESO approach introduced as so far is leaded, since both methods have been developed under the same physical assumptions. The selection of the constructal geometry is based on [89] which underlines that the cooling efficiency is not enhanced beyond the first constructal level. Consequently, two first order constructs are built with respectively six and eight elemental volumes (n_1). Using the correlations given by [104] and for $\hat{k} = 400$, the porosity of these structures is respectively $\phi = 9.8\%$ and 22.7% .

The comparison made with constructal geometries implies structures with the same external dimensions, length of heat sink and porosity. The thermal performance of each structure is calculated with the commercial finite volume code FLUENT, using exactly the same mesh methods and numerical solver, which are fully detailed in [98]. They are evaluated with the same criterion coming from constructal and ESO approach. On one hand, the adimensionalized thermal resistance is minimized and defined as [83]:

$$R = \frac{T(L, H/2) - T_s}{qLH/k_0} \quad (3.22)$$

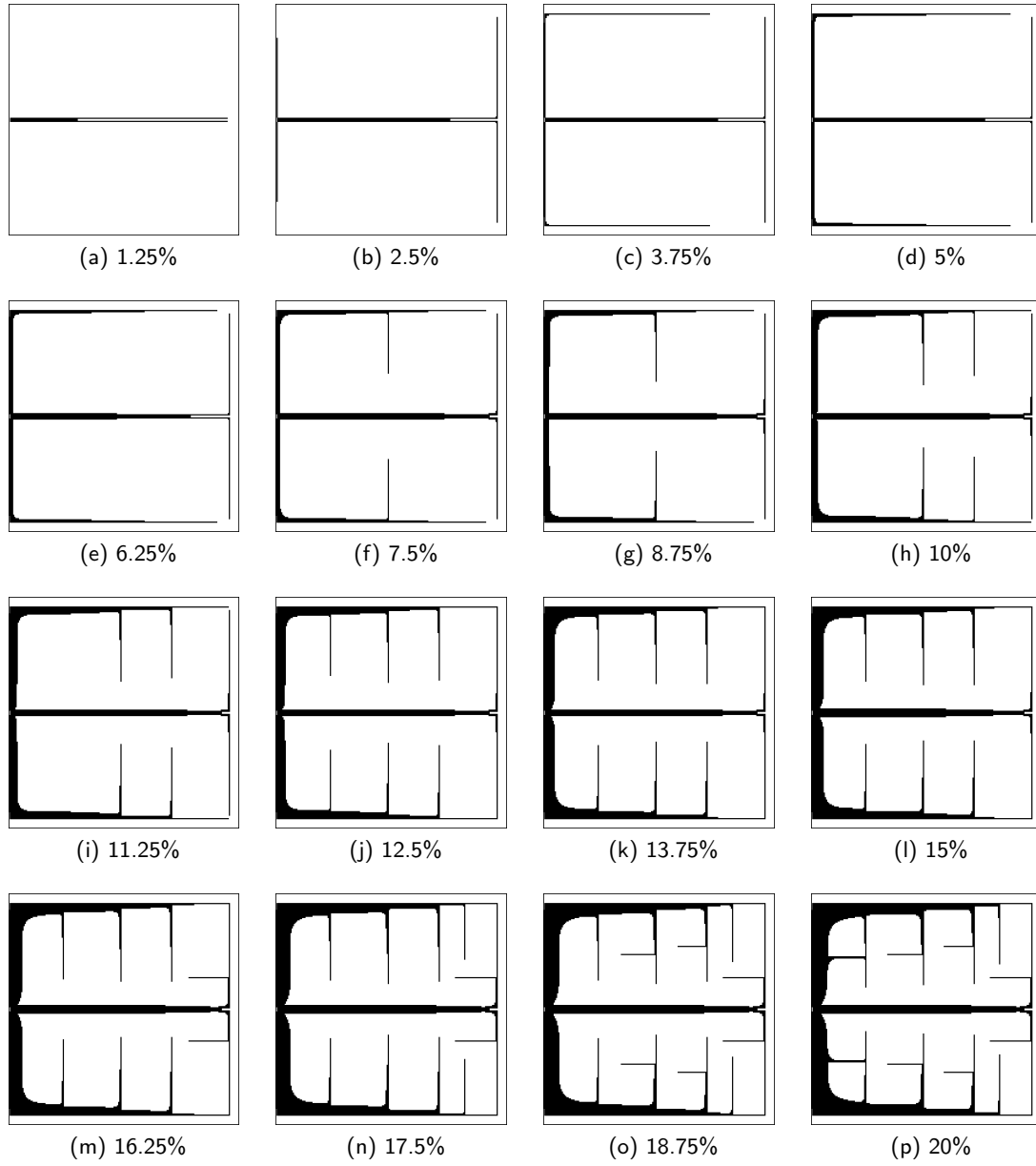


Figure 3.19: Construction vizualisation of a k_p network cooling a square volume generating heat pictured in function of the porosity of the finite-size volume.

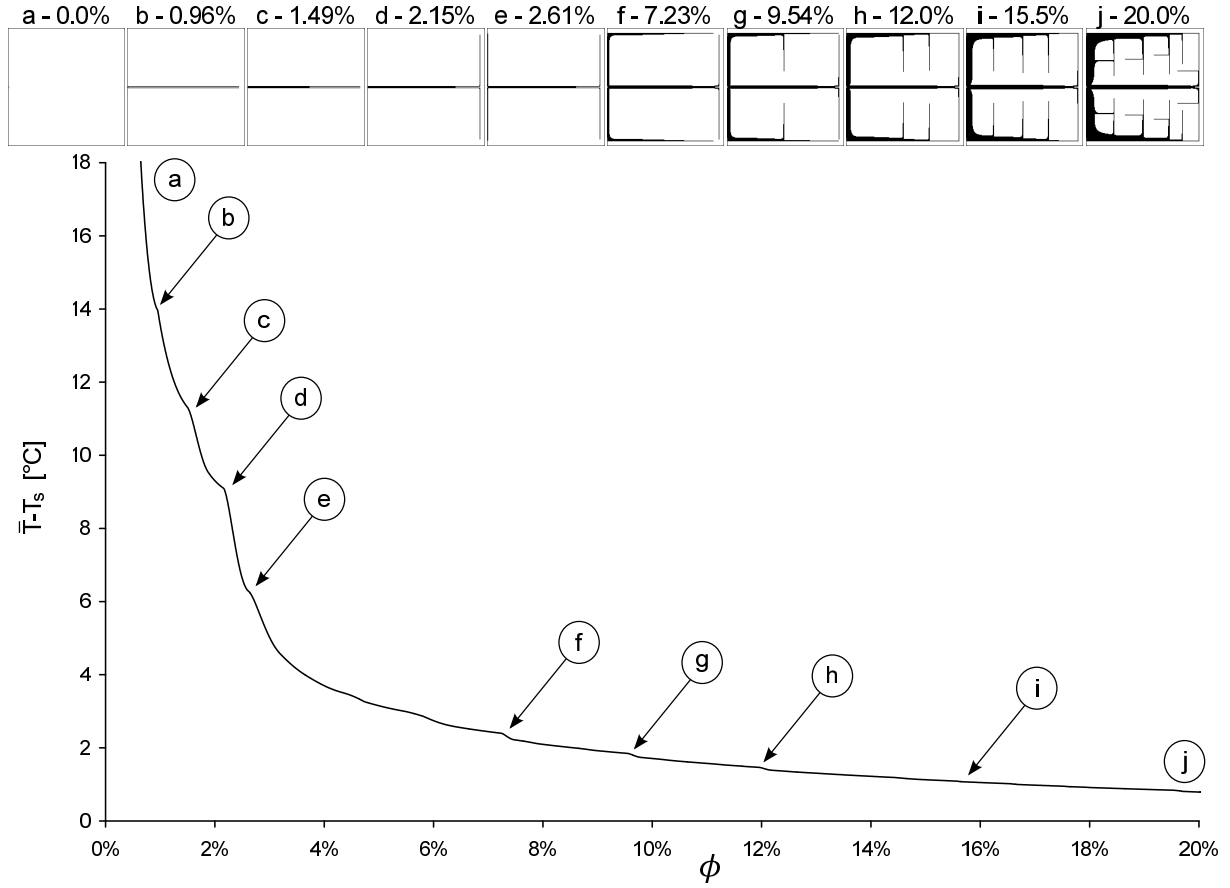


Figure 3.20: History of construction highlighting the outstanding points with their respective geometry and porosity.

On the other hand, ESO approach uses average temperature, which is a field criteria, to design the structure. It is not so far from constructal philosophy which aims “to connect a finite area (A) to a single point (M)” with high conductivity material [83]. Thereafter, mathematical assumptions lead to minimize the warmest point, but the fact remains that it initially aimed to access to every point of the finite-size volume, *i.e.* reduce each local thermal resistance. The adimensionalized average criterion is noted:

$$A = \frac{\bar{T} - T_s}{qLH/k_0} \quad (3.23)$$

Both geometries are displayed in Fig 3.21, showing better performances with ESO methods, as underlined in Table 3.21c. In ESO configurations, the warmest temperature is located in the center of k_0 material surrounded by k_p , and not anymore in the upper right-hand side corner, as in constructal structures. The better thermal performances of ESO structures can be evaluated with a different perspective: less high conductivity material is required to reach the same efficiency than the one of constructal design. For instance, the porosity of ESO structure can be reduced of 9.2% for $n_1 = 6$. Qualitatively, Fig. 3.18 and Fig. 3.21 show similarities with geometrical constructal enhancements studied by several authors. At first, the approach by scales used in constructal and fractal theories is also identifiable for ESO structures. Secondly, three local geometry adaptations existing in constructal theory are brought through ESO:

1. The spacing at tips has been introduced by Almogobel and Bejan in 1999 [99]: their study rests on giving the design more degrees of freedom and allowing the tip of high conductivity

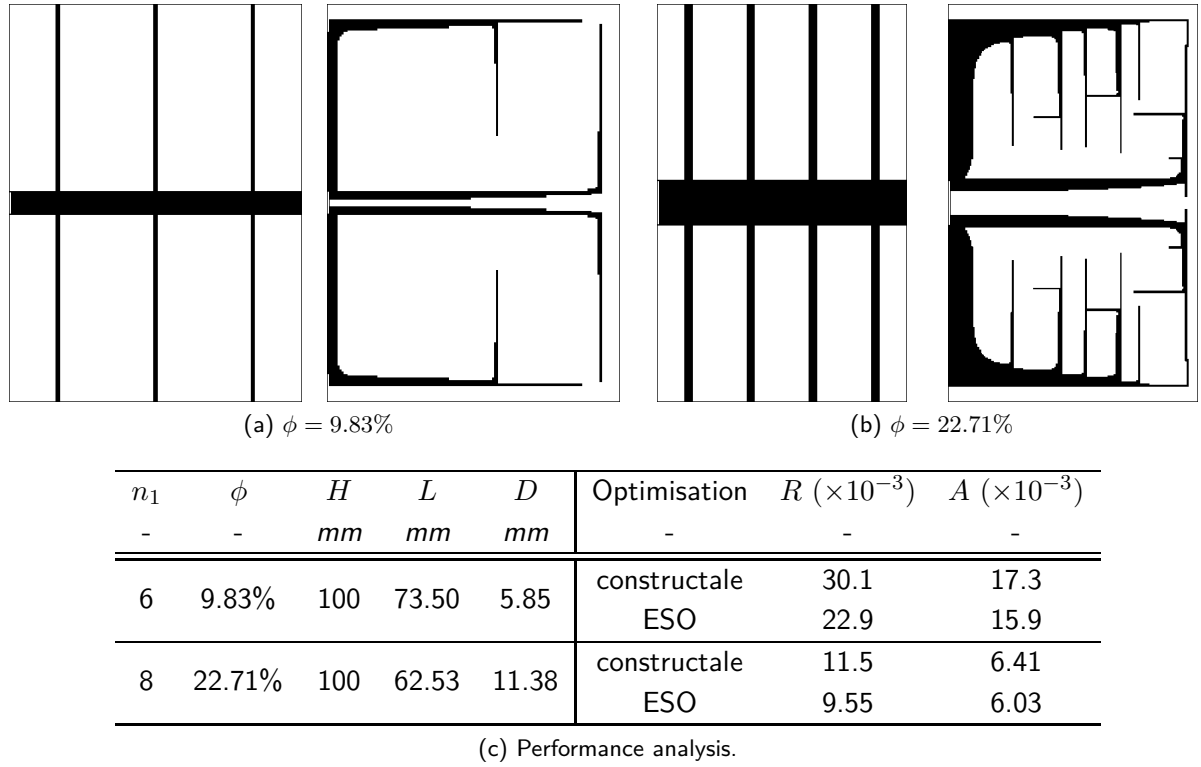


Figure 3.21: Comparison between two constructal geometries [104] and their associated ESO solution.

slab to be surrounded by k_p material. This feature also exists in ESO method, particularly in Fig. 3.18, where no k_p material from the smallest scale hits the central high conductivity path.

2. The second enhancements brought to constructal theory is relative to non-uniformly distributed tree-shaped structure [100]. In other words, the elemental volumes making the whole finite-size volume have a varying width, allowing fitting their size to reach a better cooling. This characteristic is shown in Fig. 3.21 which displays a compactness of dendrites in the same area.
3. In 2007, constructal approach have been improved once again, involving a variable cross section of conducting path [101]. This last design attribute is visible on each figure implying ESO geometries. If the heat sink is considered as a starting point, the cross section of the path becomes thinner when high conductivity material goes into the finite-size volume (Fig. 3.21b).

3.2.5 Conclusion

Based on a switching principle of boundary elements, the ESO method builds a tree-shaped network through a step-by-step approach [50]. Comparing with metaheuristic methods, such as GAs or SAs, this method takes advantage of its fully deterministic nature. Along this study, the classical ESO approach has been slightly modified from its classical formulation, especially regarding the degeneration of k_p material which has been reversed.

The iterative method of the implemented algorithm lies mainly on the continuity hypothesis of k_p material through the finite-size volume. The changes made on the structure are performed after a test loop which aims carrying out the sensitivity analysis in a direct way. The algorithm developed allows tackling global objective functions, instead of restricting their outreach to local objectives [50]. Such as defined in this study, the ESO by extension method can be easily parallelized to perform quickly the sensitivity analysis on the boundary.

A quantitative comparison shows that the reached ESO geometries are more efficient than constructal designs in accordance with different thermal criterion. Even though the ESO structures show a more important k_p material accumulation around the heat sink, they present structural features which are closed to the ones developed in the latest modifications of constructal theory, as underlined in the last section.

3.3 Conclusion à propos des automates cellulaires

Si l'approche dite ESO présente l'avantage de déboucher sur des solutions structurées et continues, l'analyse de sensibilité triviale sur laquelle elle s'appuie dans la section 3.2.2.2 engendre une lourdeur de calcul empêchant une investigation en profondeur de la méthode. Néanmoins, elle souligne que l'énonciation d'un objectif clair, *a contrario* des méthodes constructale ou par attraction locale, permet de guider l'évolution de la structure vers des solutions plus satisfaisantes, tant sur le plan qualitatif que quantitatif. En effet, dans le cadre de la comparaison menée dans les sous-sections 3.1.5 et 3.2.4, la méthode ESO égalise ou surclasse les structures obtenues par l'approche constructale ou par l'attraction locale du flux de chaleur. Cependant, cela ne saurait pour autant discréditer ces deux méthodes, ne serait-ce que parce que les critères de comparaison choisis pourraient sembler arbitraires au regard de méthodologies ne visant pas clairement à leur optimisation. De plus, dans le cas des automates cellulaires par attraction locale, l'émergence d'une structure pseudo-ordonnée globale à partir d'un critère local simple ne peut que susciter de plus amples interrogations et investigations, au même titre que les structures cohérentes émergeant du jeu de la vie de Conway [113].

L'introduction d'une fonction objectif guidant le processus d'optimisation conduit, pour une même configuration physique, à des topologies radicalement différentes, comme en témoigne la figure 3.18. Si le concepteur poursuit un but en particulier, il paraît intéressant d'établir une méthodologie d'optimisation qui puisse à la fois prendre en compte ses contraintes, tout en permettant d'aborder n'importe quel type de configurations et pas uniquement le cas d'un volume fini générant de la chaleur. Dans ce contexte, l'approche dite ESO par extension proposée dans ce chapitre souffre d'importantes limitations : l'idée de croître à partir d'un puits de chaleur la restreint à une classe bien spécifique de problème et la croissance contrôlée par ajout successif sans réallocation de matière est trop rigide. La structure finale est composée d'un empilement de solutions optimales d'une itération sur l'autre, ne garantissant en rien son optimisation globale. Il paraît donc raisonnable de supposer que les structures étudiées jusqu'à ce point ne soient que des optima locaux des problèmes *volume-to-point* traités.

Ces constatations conduisent à envisager une méthode plus globale dans le chapitre 4, connue sous la terminologie SIMP : *Solid Isotropic Material with Penalization*. A la différence de l'approche constructale et des automates cellulaires, celle-ci s'appuie sur une paramétrisation du problème qui permet d'accéder à la sensibilité de la fonction objectif aux paramètres de contrôle, pour un coût de calcul bien inférieur à l'évaluation du gradient topologique de la méthode ESO. Dès lors, la possibilité d'utiliser des méthodes d'optimisation numérique à gradient ouvre la perspective de déboucher sur des résultats plus proches mathématiquement d'un optimum global.

Chapitre 4

Solid Isotropic Material with Penalization

Ce chapitre s'inscrit dans la continuité des deux précédents en examinant l'utilisation de l'approche dite « *Solid Isotropic Material with Penalization* » (SIMP) dans le cadre du refroidissement d'un volume fini générant de la chaleur. Cette méthode s'appuie sur la technique dite d'homogénéisation en mathématiques et envisage l'optimisation de la distribution de matière de façon continue, à l'inverse des méthodes discrètes proposées dans le chapitre 3. Elle permet également d'aborder explicitement l'optimisation d'une ou plusieurs fonctions objectifs dans des configurations variables. Ces travaux ont été publiés dans *Numerical Heat Transfer : Part B, Fundamentals*, sous le titre « *Topology optimization using the SIMP method for multiobjective conductive problems* » [118], et sont accompagnés en fin de chapitre d'une analyse complémentaire.

4.1 Abstract

The efficient cooling of a finite-size volume generating heat, including adiabatic boundary conditions with the exception of a small heat sink, poses the problem of high conductivity material optimal allocation. Among the structural optimization methods, this article couples Solid Isotropic Material with Penalization parametrization (SIMP) with Aggregated Objective Function approach (AOF) to tackle this topology optimization problem through a multi objective strategy. Both average and variance temperature reduction problem is solved by the identification of its Pareto front, which is highly dependent of the high conductivity material quantity. This study also underlines the link between the sensitivity analysis of both objective functions, which is required by the Method of Moving Asymptotes (MMA). Furthermore, additional calculations have been led to include heat generation rate variations between both conductive materials by means of an additional penalization strategy. The main conclusion deals with the possibility of finding an acceptable trade-off between average and variance objective functions thanks to the convex shape of Pareto frontiers.

4.2 Introduction

Optimization of heat and mass transfer configurations can take various forms depending on the control variables involved along the numerical process. Considering the leading problem of heat exchange intensification, three strategies can be distinguished: i) methods which involve modification of physical parameters such as boundary conditions, ii) approaches which geometrically affect the shape of structures and iii) topology optimization which aims to implement the best layout of the material. Regarding the first class, several authors propose enhanced boundary parameters for forced convection problems. In the frame of steady state problems, optimization is performed by optimally locating the heat sources along the system considered [119], whereas unsteady cases require the

Nomenclature

| | |
|--------------|------------------------------|
| $\mathbb{1}$ | unitary vector |
| A_p | FVM central coefficient |
| A_s | FVM side coefficient |
| f | objective function |
| h | heat transfer coefficient |
| \mathbb{K} | high conductivity set |
| k | thermal conductivity |
| L, ℓ, H | length, height |
| m, n | limits of spatial index |
| N | number of elements |
| p | penalization parameter |
| q | heat generation rate |
| r | densitivity filter radius |
| S_u | FVM thermal load coefficient |
| \mathbb{T} | temperature set |
| T | temperature |
| V | volume |
| w | AOF weighting |
| x, y | coordinate |

Greek letters

| | |
|----------------------|-------------------------------------|
| $\Delta x, \Delta y$ | mesh size |
| δ_p | high conductivity index |
| ϵ_i | convergence criterion of inner loop |
| ϵ_o | convergence criterion of outer loop |

| | |
|-----------|-------------------|
| η | design parameter |
| λ | adjoint parameter |
| ϕ | porosity |
| Ω | spatial set |

Subscripts

| | |
|--------|----------------------------|
| 0 | heat generating material |
| ad | admissible |
| av | average |
| bo | bi-objective |
| i | vector index |
| i, j | spatial index |
| h, v | horizontal, vertical |
| p | high conductivity material |
| ref | reference |
| s | heat sink |
| t | temperature |
| vr | variance |

Symbols

| | |
|---------------------|---------------------------|
| $\overline{\cdot}$ | maximal |
| $\widetilde{\cdot}$ | FVM numerical filter |
| $\hat{\cdot}$ | objective function filter |
| $\underline{\cdot}$ | minimal |

Vectors and matrices are in bold letters

spatial and temporal assessment of the heat flux [120, 121]. The second class, involving structural and shape modifications, is usually tackled by means of metaheuristic methods such as genetic algorithms, to fully take into account the multi-objective nature of the problem. The fluid-solid interface is parametrized in order to evolve toward an optimized surface, as demonstrated by Cavazzuti and Cheng (*et al.*) [36, 40]. The last category lies on topology optimization which aims to implement materials without any mind-set regarding their final configuration and has been successfully applied to conduction problems [41, 59, 75].

More specifically, the volume-to-point (VP) heat conduction problem, introduced by Bejan in 1997 [83], has continuously held the interest of the scientific community. It has been initially disclosed as a leading example illustrating constructal theory and has been defined as:

Consider a finite-size volume in which heat is being generated at every point, and which is cooled through a small patch (heat sink) located on its boundary. A finite amount of high conductivity (k_p) material is available. Determine the optimal distribution of k_p material through the given volume such that the highest temperature is minimized.

Beyond this academic posing, the efficient cooling of small electronic devices can be addressed: such components require cooling networks cleverly allocated in their bulk, since the more they are miniaturized, the more their heat generation rate increases. Simultaneously to constructal theory, several methods have been developed or adapted to solve this challenging optimization problem, using algorithms driven by methods ranging from physical analysis to a more mathematical approach.

Among them, and coming to the forefront, constructal theory has met a large success since its publication [83]. Its philosophy lies on a construction process taking place from the smallest scales towards the largest ones. Its development has been partly based on the observation of organization in Nature and it aims creating a bridge between physics and biology [85]. From a more conceptual point of view, constructal theory does not involve any kind of objective function and is comparable to size optimization considering that each elemental volume is optimized by means of its aspect ratio and the width of its high conductivity path. This lack of objective function has opened the way of criticisms [98], disregarding several enhancements proposed in the dedicated literature [108].

Another approach tackling the same problem has been proposed by Xia *et al.* who titled it *bionic optimization* [47]. This principle considers the high conductivity material as being alive and its growth is consequently located where the maximum temperature gradient is. Boichot *et al.* [52] also studied this approach, named over *morphing by gradient attraction*, to rearrange the high conductivity networks coming from constructal geometries. Similarly, Mathieu-Potvin and Gosselin [51] developed an original approach using the same criteria, but adding a swapping between heat generating and void cells. These three studies use a local criterion to conduct the optimization process, and therefore, the strategy does not comprise an objective function, following the example of constructal theory. However, unlike this approach, bionic optimization belongs to the topology class, since it allows fractions of high conductivity material to be located in any position within the calculation field.

Metaheuristic tools have become a prevailing cross-disciplinary optimization technique, and more specifically simulated annealing (SA) and single-objective genetic algorithms (GAs). Both implementations have been used by Xu *et al.* [53] in order to solve Bejan's problem and make a comparison with the structures coming from constructal theory or bionic optimization: their conclusions outline some structural similarities between these geometries. A technical note has also been published by Pedro *et al.* [54], using GAs to minimize the highest temperature of a conductive field and investigate the link between the robustness of structure and its complexity level.

Two additional methods based on topology optimization are well known for providing interesting results in the frame of cooling a finite-size volume generating heat: *Evolutionary Structural Optimization* (ESO) [114] and *Solid Isotropic Material with Penalization* (SIMP) [2]. From an algorithmic point of view, these methods have more complex structures than the one introduced so far, since they both require an objection function and its derivative with respect to the variables of design. Therefore, ESO and SIMP are both gradient-based algorithms and mainly differ from each other by their parametrization: ESO principle lies on a discrete design variable method [46, 50], also called *hard kill* method, in opposition to a continuous design variable approach introduced in SIMP [59, 70], known as the *soft kill* method. Physically, hard kill parametrization in ESO locally adds or removes high conductivity material in one step, whereas soft kill approach used in SIMP increases or decreases it by a small quantity. Consequently, the continuous approach allows the high conductivity network going through intermediate states, characterized by local thermal conductivities k ranging from k_0 to k_p .

This article addresses the efficient cooling of a finite-size volume generating heat by means of SIMP method. This approach, and in particular its continuous structural parametrization, allows creating radically new designs from an explicit objective function. Nevertheless, several thermal problems require a multi-objective approach to fulfill different technical goals, and such optimization problems have not been investigated in scientific literature yet. As an example, the aforementioned problem related to the cooling an electronic device can be tackled with at least two objective functions. On the one hand, minimizing the average temperature in order to ensure the best cooling is a straightforward strategy. On the other hand, lowering the average temperature does not provide any guarantee of avoiding hot temperature spots that could locally destruct the electronic component.

An additional objective function, equal to the temperature variance, can be minimized to ensure that the temperature field remains as homogenous as possible. Consequently, minimizing both objective functions allows reaching the best cooling shape for the high conductivity network, while maintaining the maximum hot spots as low as possible.

After introducing the physical and mathematical formulation of this problem, this study starts off with stating the fundamental feature of SIMP method, which is the penalization approach, and provides an overview of the successive steps required by the optimization process. Then, a short section recalls few basics of Finite Volume Method (FVM) which is used to solve the energy equation, followed by the suitable strategy to perform the sensitivity analysis with this specific discretization method. These derivative evaluations are fully detailed for two objective functions based on the temperature field: average and variance. Next, a point is made about the best strategies allowing preventing checkerboard problems and the Method of Moving Asymptotes (MMA), the numerical optimization method used in SIMP, is addressed on the basis of Svanberg's work [122]. Section 4.4 deals with the bi-objective optimization problem and introduces the adaptations required for it and its sensitivity analysis. And finally, last section investigates the structures reached, regarding their convergence process, their numerical parameters, and their behavior under a bi-objective optimization.

4.3 SIMP presentation

This section aims at introducing the main characteristics of SIMP method in the frame of cooling a finite-volume generating heat. Special attention is given to the sensitivity analysis step, especially for the temperature variance function.

4.3.1 Introduction to SIMP

The energy differential equation driving the heat flux inside the finite-size volume lies on several assumptions: at first, all calculations are run under steady state conditions, meaning that the whole heat produced by the volume is evacuated through the heat sink. Secondly, material generating heat (k_0) and high conductivity material (k_p) are viewed as homogenous and isotropic, without effect of temperature on their respective conductivity. In order to limit the scope of investigation, some geometrical and physical parameters are set along this paper:

- The thermal conductivity are constant, with $k_0 = 1 \text{ W/(m.K)}$ and $k_p = 100 \text{ W/(m.K)}$. These values have been selected to ensure a high-complexity level to the final structures, since Zhang *et al.* [70] show that it increases in proportion to k_p/k_0 ratio.
- All structures have a square aspect ratio ($L = H = 0.1 \text{ m}$), with a heat sink located in the middle of their west side.
- Except the heat sink characterized thanks to a Dirichlet boundary condition ($T_s = 0^\circ\text{C}$), all the other boundaries are adiabatic ($\nabla T = 0$).

Figure 4.1 shows a configuration based on these parameters, with an arbitrary distribution of high conductivity material (black part) through the finite-size volume. The hatched line pictures an axis of symmetry, which allows reaching structures from symmetrical or unsymmetrical boundary conditions, and therefore making comparisons validating the algorithm behavior. The academic problem introduced in Section 4.2 aims at minimizing an objective function f depending on the temperature field by optimizing the distribution of high conductivity material. A proper mathematical posing of this problem requires to define three main sets:

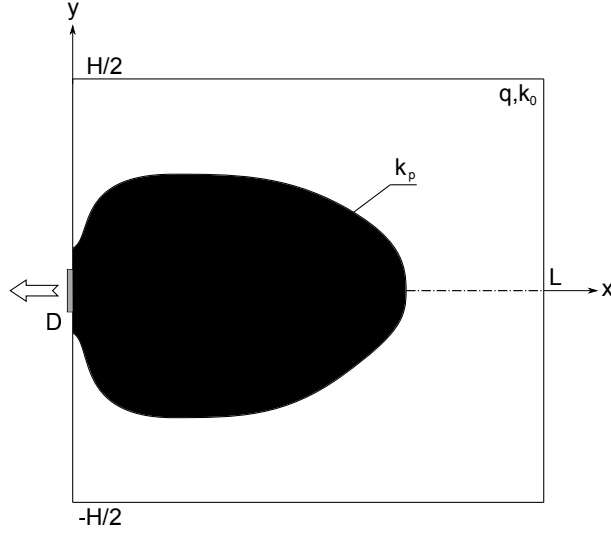


Figure 4.1: Finite-size volume generating heat (q, k_0) cooled thanks to a high conductivity structure (k_p) with an arbitrary shape.

- $\mathbf{x} \in \Omega$ describes the two dimensional spatial field, divided into two subdomains Ω_0 and Ω_p , such as $\Omega = \Omega_0 \cup \Omega_p$. They are respectively made of materials with k_0 and k_p conductivity (white and black parts in Fig. 4.1).
- $\mathbf{k} \in \mathbb{K}$ pictures the distribution of high conductivity material,
- $\mathbf{T} \in \mathbb{T}$ is the temperature field that satisfies the energy equation: $\nabla \cdot (k \nabla T_{\mathbf{k}}) + q = 0$ where q stands for the local heat generating rate.

It is worth noting that local temperature T strongly depends on \mathbf{k} field within this context: this link is materialized by adding a subscript to temperature, *i.e.* $T_{\mathbf{k}}$.

Following these assumptions, the optimization problem can be stated under its continuous form as:

$$\begin{aligned} & \min_{T \in \mathbb{T}, \mathbf{k}} f(T) \\ & \text{subject to } \nabla \cdot (k \nabla T_{\mathbf{k}}) + q = 0 \\ & \mathbf{x} \in \Omega, \mathbf{k} \in \mathbb{K}_{ad} \end{aligned} \quad (4.1)$$

From now on, \mathbb{K} is restricted to \mathbb{K}_{ad} such as $\mathbb{K}_{ad} \subset \mathbb{K}$. This artificial restriction regarding the distribution of high conductivity material represents the impact of new constraints added to the initial problem, such as:

$$\int_{\Omega} \delta_p d\Omega \leq V \text{ with } \begin{cases} \delta_p = 0 & \text{if } \mathbf{x} \in \Omega_0 \\ \delta_p = 1 & \text{if } \mathbf{x} \in \Omega_p \end{cases} \quad (4.2)$$

This constraint reduces the number of possible realizations for \mathbf{k} , by requiring that the quantity of k_p material does not exceed a volume V . This condition allows not covering the whole domain with k_p material, which is the trivial best solution for most of temperature reduction problems. Other topological constraints can be addressed, for instance the Poulsen scheme as underlined by Bendsoe and Sigmund in [2], also creating additional restrictions to \mathbb{K}_{ad} .

4.3.1.1 Penalization process

The main difficulty emerging from this formulation is to deal with the discrete nature of high conductivity material distribution. Concretely, the algorithm performing the optimization process

must have the ability of modifying Ω_0 or Ω_p sets, namely by changing the links between the local high conductivity elements. Typically, the optimization algorithm must be capable of reallocating k_p material, or creating "holes" in its structure, to minimize the objective function $f(\mathbf{T})$. Such algorithm requires to evaluate the impact of each element on $f(\mathbf{T})$ when its thermal conductivity is swapped around from k_0 to k_p , or conversely. This evaluation must be performed over all the Ω domain with the smallest element size as possible, making it particularly time-consuming with the exception of some particular configurations [50].

SIMP approach workarounds this problem by converting *topology* optimization into *sizing* optimization, thanks to a continuous local thermal conductivity. This value is locally controlled through a dimensionless parameter η , called design parameter, and ranging from 0 to 1:

$$k(\eta) = k_0 + (k_p - k_0)\eta^p \text{ with } 0 \leq \eta \leq 1 \text{ and } p \geq 1 \quad (4.3)$$

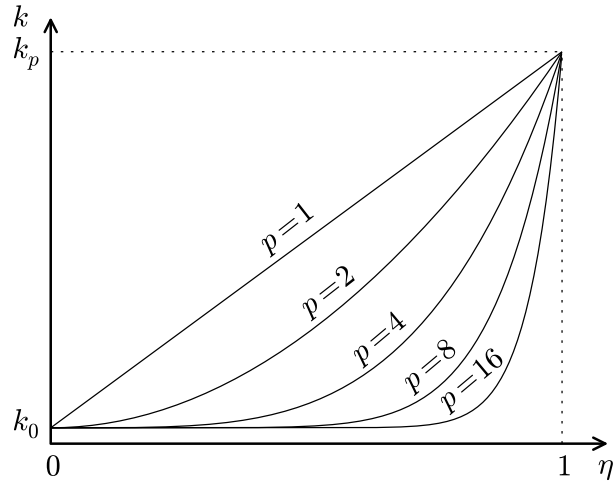
Following this parametrization, the thermal conductivity equals k_0 when $\eta = 0$, and k_p when $\eta = 1$. Furthermore, a penalization parameter p is added and plays a central role in the convergence process. Indeed, without penalization parameter, SIMP method converges through a composite structure where Ω_0 and Ω_p are not clearly defined: each fraction of the finite-size volume is made from different proportions of k_0 and k_p materials.

Figure 4.2a pictures the influence of p on the convex function $k(\eta)$ for different values. In order to reach 1 – 0 structures, the penalization parameter is gradually increased from 1, which puts the objective function at a disadvantage if η is not equal to 1. Indeed, following Eq. (4.3), if p is sufficiently large, such as $p \gg 1$, then $k_0 \gg (k_p - k_0)\eta^p$ for $0 \leq \eta < 1$, leading to $k(\eta) \approx k_0$. In other words, all values η being not equal to 1 provides a thermal conductivity equal to k_0 . In the frame of temperature minimization problems, this behavior penalizes the intermediate values of η : they are well taken into account by the porosity evaluation but do not impact the objective function since no high conductivity material is added to Ω_p . Consequently, SIMP method obliges each design parameter belonging to 0 or 1 to be fully efficient.

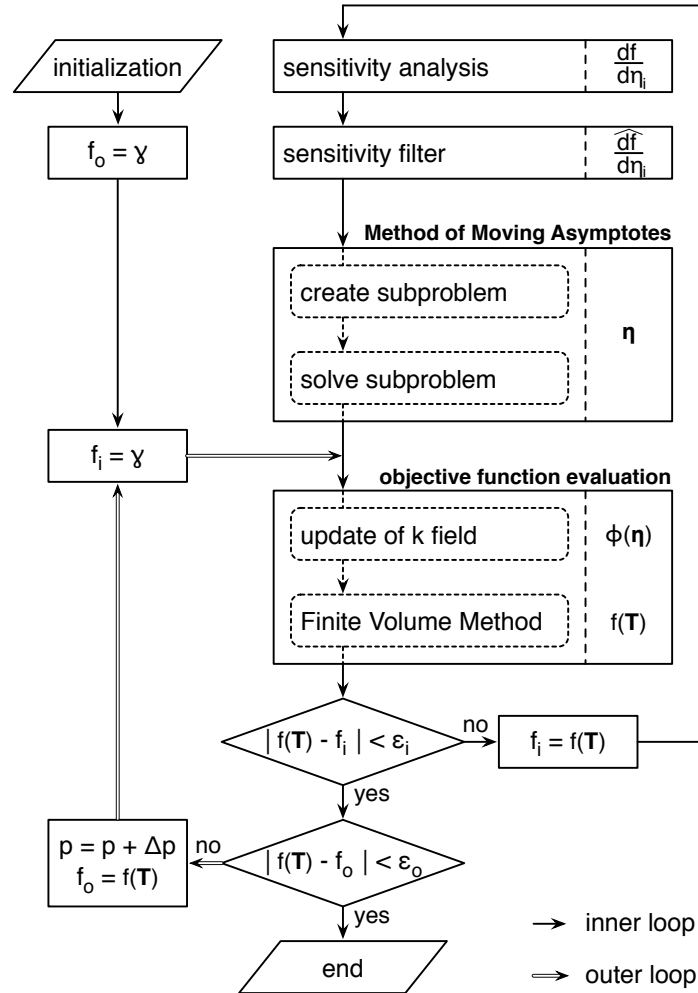
The SIMP strategy developed through this article lies on the ones proposed through the literature [2, 59, 70]. Figure 4.2b shows the different steps required to perform the optimization method, which are divided into two main loops:

- The inner loop is pictured on the top and right corner of the figure and summarizes the four classic steps of SIMP, detailed in the following sections:
 1. the evaluation of the objective function by means of a discretization scheme;
 2. the sensitivity analysis computing its gradient;
 3. the numerical filtering step;
 4. the optimization algorithm (Method of Moving Asymptotes).
- The outer loop is underlined with double lines and fully merges the inner loop. Its main role is to slightly increase the penalization parameter p once the convergence has been reached for its previous state.

Exiting a loop is based on a convergence test, pictured by a black diamond. The residual of each loop is evaluated as the absolute value of the difference between the current objective function $f(\mathbf{T})$ and its value at the previous iteration, respectively f_i for the inner loop (\rightarrow , Fig. 4.2b) or f_o for the outer loop (\Rightarrow , Fig. 4.2b). Each residual must be lower than its limit ϵ to exit the current loop, generally $\epsilon_i = 10^{-4}$ and $\epsilon_o = 10^{-3}$. f_i and f_o are typically initialized with a large value γ , roughly equal to ten times the order of magnitude of the initial objective function. Furthermore, some multi-objective calculations through this article deal with values of $f(\mathbf{T})$ close to 0, and consequently discard residuals calculated from a relative difference, involving f_i or f_o to its denominator.



(a) Influence of penalization parameter p on convex function $k(\eta)$ for $p = 1, 2, 4, 8, 16$.



(b) Main loops of SIMP strategy: outer loop (double line arrow) and inner loop (single line arrow).

Figure 4.2: Integration of penalization process into SIMP strategy.

4.3.1.2 Checkerboard problems

Apart from the penalization process aiming at creating 1–0 structures, SIMP method requires a few additional adjustments to workaround the checkerboard problems involving non-physical solutions. This class of problems has been identified since the beginning of numerical methods [96] and roots mainly in the discretization process of partial differential equations. Indeed, the evaluation of $f(\mathbf{T})$ is based on the preliminary knowledge of the temperature field \mathbf{T} , which is performed thanks to a numerical method such as Finite Element or Volume Method established from energy equation. These approaches mainly rely on a grid, where each mesh, also called control volume, is made of k_0 or k_p material. A checkerboard occurs when the solution converges towards a structure where some meshes successively belong to Ω_0 and Ω_p sets, as pictured on Fig. 4.8a. This pattern is formed locally and usually expands its design over the whole high conductivity structure thanks to the optimization process. This behavior artificially maximizes the impact of k_p material on \mathbf{T} by maximizing the heat transfer area between k_0 and k_p materials, and accordingly minimizes its objective function.

One of the best solutions avoiding this behavior is to keep separate the grids related to the temperature scalars and the design parameters [2,59]. This staggered scheme is displayed on figure 4.3 in the frame of a cartesian mesh: the field of design parameters (left side) is plotted beside the field of temperature scalars (right side). Both grids are shifted of half of the mesh size, in such a way that the design elements fit and cover the whole calculation area. In this instance, if $N_\eta = m \times n$ design elements are required to hold the set Ω , it involves $N_t = (m+1) \times (n+1)$ temperature elements. In most cases, the staggered strategy is adequate to avoid checkerboard problems, even though it adds several new equations in order to link the design information and the conductivity field, as detailed in Section 4.3.2. However, an additional procedure relying on filtering the sensitivity is presented in Section 4.3.4, if dissociating the grids is insufficient.

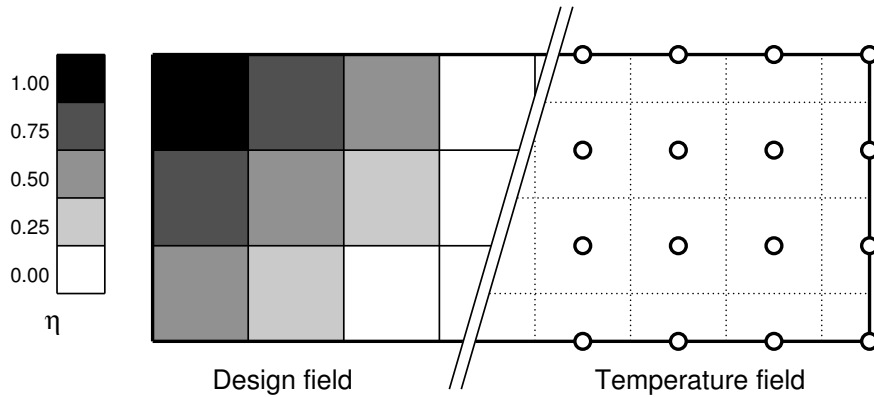


Figure 4.3: Staggered strategy with cartesian grid for SIMP method: 3×3 design parameters (left side) beside 4×4 temperature scalars (right side).

4.3.2 Finite Volume Method

The Finite Volume Method (FVM) has been implemented in order to solve the temperature field for two reasons: on the one hand, a very few investigations has been carried out by the thermal scientific community about the adequacy of SIMP method with such discretization scheme, with the exception of Gersborg-Hansen *et al.* [59]. On the other hand and from more applied perspectives, linking SIMP approach with FVM could be particularly fruitful regarding its possible and numerous industrial implications. This section does not aim at introducing the FV approach in the frame

of heat conduction, which is well established in literature [96], but only details on how the design parameters η are blended within the method.

FVM discretizes the following energy equation:

$$\nabla \cdot (k \nabla T) + q = 0 \quad (4.4)$$

Considering a cartesian grid involving $N_t = (m + 1) \times (n + 1)$ temperature control volumes of unchanging size $\Delta x \times \Delta y$, the position of each element is located on the temperature grid thanks to two indexes $0 \leq i \leq m$ and $0 \leq j \leq n$. Figure 4.4a spatially pictures this configuration, with respectively:

1. the squares representing the center of design elements (light gray) where the variables $\eta_{i,j}$ and $k_{i,j}$ are locally stored. The link between both of them is made through Eq. (4.3);
2. the staggered diamonds symbolizing the center of a common temperature control volume (dark gray), such as defined in Versteeg *et al.* [96]. It also stores two variables $A_p^{i,j}$ and $T_{i,j}$ and is surrounded by coefficients A_h and A_v located on its interfaces, pictured with octagons.

Following these assumptions and for a given temperature control volume (i, j) , the discretized form of Eq. (4.4) is:

$$\begin{aligned} A_p^{i,j} T_{i,j} &= A_h^{i,j} T_{i-1,j} + A_h^{i+1,j} T_{i+1,j} + A_v^{i,j} T_{i,j-1} + A_v^{i,j+1} T_{i,j+1} + S_u^{i,j} \\ \text{with } A_p^{i,j} &= A_h^{i,j} + A_h^{i+1,j} + A_v^{i,j} + A_v^{i,j+1} \end{aligned} \quad (4.5)$$

The last term defines the local heat generated over the control volume, which is $S_u = \tilde{q} \Delta x \Delta y$ where \tilde{q} is the local heat generation rate. Furthermore, the interface coefficients A_h and A_v respectively depends on their interfacial thermal conductivity, respectively \tilde{k}_h and \tilde{k}_v , such as:

$$A_h = \frac{\tilde{k}_h \Delta y}{\Delta x} \quad \text{and} \quad A_v = \frac{\tilde{k}_v \Delta x}{\Delta y} \quad (4.6)$$

The last issue regards how to link the thermal conductivity k coming from the design parameters to the interfacial thermal conductivity \tilde{k} . The challenge is to conveniently move the conductivity k from the center of design element to its interfaces, which coincide with the interfaces of temperature control volumes. In order to do this, a numerical filter is applied and two formulations are available in literature [59]:

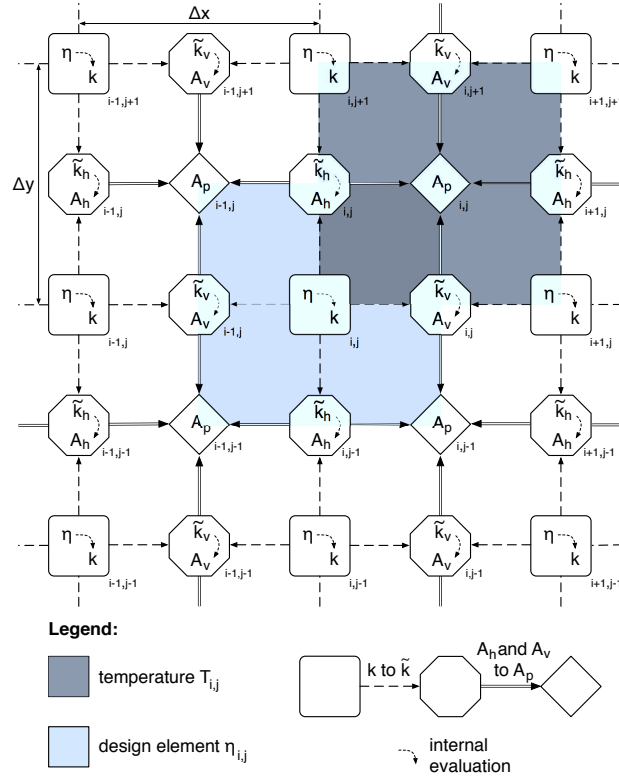
- Arithmetic mean:

$$\tilde{k}_{h/v} = \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N k_s \quad (4.7)$$

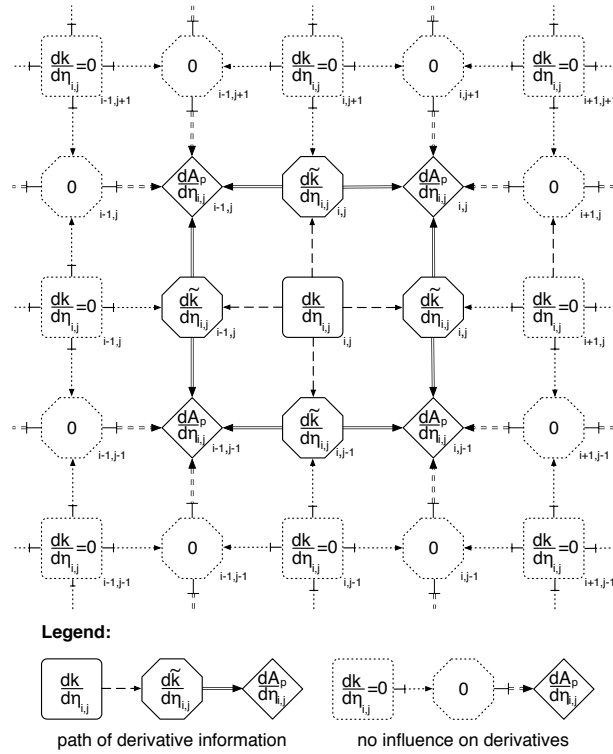
- Harmonic mean:

$$\tilde{k}_{h/v} = N \left/ \sum_{s=1}^N \frac{1}{k_s} \right. \quad (4.8)$$

For $N = 2$, the filter provides an interfacial value based on the two closest design parameters, which are required for evaluating A_h or A_v . For $N = 4$, the thermal conductivity calculated is based on the mean value of the four design elements surrounding a temperature control volume: this point is exploited in Section 4.3.3.3. Figure 4.4a shows the structural information path, taking place from element $\eta_{i,j}$ up to the 4 temperature control volumes centered at its corners. In the end, all coefficients A_p and $A_{h/v}$ are based on the function composition $(\tilde{k} \circ k)(\eta)$, symbolized by the dashed arrows: this is a key point for the sensitivity analysis, detailed in Section 4.3.3.



(a) $A_{h/v}$ and A_p evaluation from $\eta_{i,j}$ via filtering of interfacial conductivity $\tilde{k}_{h/v}$.



(b) A_p and $A_{h/v}$ derivative evaluation with respect to $\eta_{i,j}$ from $\partial k / \partial \eta_{i,j}$.

Figure 4.4: Direct and derivative evaluation of $A_{h/v}$ and A_p coefficients.

A system of equations is established by assembling the N_t equations (4.5) over the calculation field and is known as the discretized form of energy equation: $\mathbf{KT} = \mathbf{Q}$. Within this context, \mathbf{K} is a symmetrical pentadiagonal band matrix made of coefficients A_p and $A_{h/v}$ [96] and \mathbf{T} and \mathbf{Q} are two vectors, representing respectively the temperature field and the thermal load by means of S_u terms. This system is solved using a standard conjugate gradient method with Jacobi preconditioner. The optimization problem (4.1) can be discretized as:

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\eta}} \quad & f(\mathbf{T}) \\ \text{subject to} \quad & \mathbf{KT} = \mathbf{Q} \\ & \frac{1}{N_\eta} \mathbf{1}^t \boldsymbol{\eta} \leq \bar{\phi} \\ & \mathbf{k} = k_0 \mathbf{1} + (k_p - k_0) \boldsymbol{\eta}^p \\ & 0 \leq \boldsymbol{\eta} \leq 1 \text{ and } p \geq 1 \end{aligned} \quad (4.9)$$

where $\mathbf{1}^t = (1, 1, \dots, 1)$, $\boldsymbol{\eta}$ and \mathbf{k} are vectors of size N_η and $0 \leq \boldsymbol{\eta} \leq 1$ means that $0 \leq \eta_i \leq 1, \forall i \in [1, N_\eta]$. The constraint (4.2) has been discretized and adimensionalized by introducing the maximal porosity $\bar{\phi}$, which represents the maximal fraction of high conductivity material allowed within the whole domain Ω .

4.3.3 Sensitivity analysis

The sensitivity analysis aims at evaluating the derivative of f with respect of $\boldsymbol{\eta}$, which is required by the Method of Moving Asymptotes. Several different methods exist in order to lead this analysis, such as finite difference method or automatic differentiation: a discrete adjoint formulation has been selected in the frame of the problem under consideration [59]. From a methodological point of view, it has the advantage of clearly displaying the information path for the derivative and helps understanding its evaluation. So far in this article, the objective function $f(\mathbf{T})$ has not been formulated, because the adjoint method strongly depends on it. The next two subsections aim at introducing the evaluation of $df/d\eta_i$ for $i \in [1, N_\eta]$ in the frame of average and variance temperature objective function.

4.3.3.1 Average temperature

The first objective function is related to average temperature minimization and this objective function is evaluated as followed:

$$f_{av}(\mathbf{T}) = \frac{1}{N_t} \mathbf{1}^t \mathbf{T} \quad (4.10)$$

Considering the reduced problem comprising $f_{av}(\mathbf{T})$ subject to $\mathbf{KT} = \mathbf{Q}$, the objective function can also be stated as:

$$f_{av}(\mathbf{T}) = \frac{1}{N_t} \mathbf{1}^t \mathbf{T} + \underbrace{\lambda_{av}^t (\mathbf{KT} - \mathbf{Q})}_{=0} \quad (4.11)$$

without modifying its value if the discrete energy equation $\mathbf{KT} = \mathbf{Q}$ is verified. The additional variable $\lambda_{av}^t = (\lambda_{av}^1, \lambda_{av}^2, \dots, \lambda_{av}^{N_t})$ is the adjoint vector and has the same dimension as the one of temperature parameters. By differentiating Eq. (4.11) with respect of η_i , the sensitivity of f_{av} is:

$$\frac{df_{av}}{d\eta_i} = \frac{1}{N_t} \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \eta_i} + \lambda_{av}^t \left(\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \eta_i} \mathbf{T} + \mathbf{K} \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \eta_i} - \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \eta_i} \right) \quad (4.12)$$

At this point, the heat generation rate is assumed to be independent of k_0 or k_p material and homogeneous over the whole finite-size volume. In other words, the thermal load vector does not depend on the design parameters, involving that $\partial \mathbf{Q} / \partial \eta_i = 0$. Subsection 4.3.3.3 details the additional calculations required to consider materials having different heat generating rates.

The main difficulty of Eq. (4.12) lies on the evaluation of $\partial \mathbf{T} / \partial \eta_h$, showing the influence of design parameters on the the temperature field. The advantage of adjoint method is to workaround the delicate evaluation of temperature derivative, by rearranging the terms of Eq. (4.12) in order to isolate $\partial \mathbf{T} / \partial \eta_h$:

$$\frac{df_{av}}{d\eta_h} = \left(\lambda_{av}^t \mathbf{K} + \frac{\mathbf{1}^t}{N_t} \right) \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \eta_h} + \lambda_{av}^t \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \eta_h} \mathbf{T} \quad (4.13)$$

Therefore, the evaluation of temperature derivative is worthless, if λ_{av} is a solution of the following system of equations:

$$\lambda_{av}^t \mathbf{K} + \frac{\mathbf{1}^t}{N_t} = 0 \Leftrightarrow \mathbf{K} \lambda_{av} = -\frac{\mathbf{1}}{N_t} \quad (4.14)$$

which is solved using the same numerical method as $\mathbf{K} \mathbf{T} = \mathbf{Q}$. Consequently, the sensitivity of objective function is directly calculated from Eq. (4.13):

$$\frac{df_{av}}{d\eta_h} = \lambda_{av}^t \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \eta_h} \mathbf{T} \quad (4.15)$$

In Eq. (4.15), \mathbf{T} and λ_{av} terms are both known from solving their respective discrete equations, respectively Eqs. (4.9)-(4.14), whereas $\partial \mathbf{K} / \partial \eta_h$ term is more complex to calculate. Its evaluation lies on the function composition described in Subsection 4.3.2 and Fig. 4.4a, using cartesian indexes (i, j) to describe the calculation fields: matrix \mathbf{K} is made of coefficients $A_{h/v}$ and A_p , all lying on the interfacial conductivities \tilde{k} coming from vector $\mathbf{k}(\boldsymbol{\eta})$. Regarding this chain rule derivative, this means that $\partial \mathbf{k} / \partial \eta_{i,j}$ is a central element for evaluating $\partial \mathbf{K} / \partial \eta_{i,j}$, which can be calculated from Eq. (4.3) as:

$$\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial \eta_{i,j}} = \begin{cases} p(k_p - k_0) \eta_{i,j}^{p-1} & \text{for } (i, j)^{th} \text{ element} \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad (4.16)$$

Figure 4.4b shows the implications of Eq. (4.16) on the derivative fields: after the derivative operation, only the eight elements surrounding the design parameter $\eta_{i,j}$ are nonzero. A comparison must be made with Fig. 4.4a in order to clearly visualize which information paths are broken, pictured with dashed arrows in Fig. 4.4b. Consequently, matrix $\partial \mathbf{K} / \partial \eta_{i,j}$ does not include more than these eight different elements, leading to a 4-by-4 symmetrical pentadiagonal band matrix:

$$\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \eta_{i,j}} = \frac{\partial}{\partial \eta_{i,j}} \begin{pmatrix} A_p^{i-1,j-1} & -A_h^{i,j-1} & 0 & -A_v^{i-1,j} \\ -A_h^{i,j-1} & A_p^{i,j-1} & -A_v^{i,j} & 0 \\ 0 & -A_v^{i,j} & A_p^{i,j} & -A_h^{i,j} \\ -A_v^{i-1,j} & 0 & -A_h^{i,j} & A_p^{i-1,j} \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

This reduced form must be used in conjunction with reduced vectors for evaluating $df_{av} / d\eta_{i,j}$, which are respectively $\lambda_{av}^t = (\lambda_{av}^{i-1,j-1}, \lambda_{av}^{i,j-1}, \lambda_{av}^{i,j}, \lambda_{av}^{i-1,j})$ and $\mathbf{T}^t = (T_{i-1,j-1}, T_{i,j-1}, T_{i,j}, T_{i-1,j})$. Equation (4.15), and consequently matrix (4.17), is computed N_η times in order to evaluate the whole set of derivatives.

4.3.3.2 Variance temperature

The second objective function tackles the problem of reaching a temperature field as homogeneous as possible. In this context, minimizing the temperature variance, and consequently its standard deviation, is a suitable strategy:

$$f_{vr}(\mathbf{T}) = \frac{1}{N_t} (\mathbf{T} - \mathbf{1} f_{av})^t (\mathbf{T} - \mathbf{1} f_{av}) \quad (4.18)$$

As previously mentioned, f_{vr} can be rewritten using the constraint $\mathbf{K} \mathbf{T} = \mathbf{Q}$:

$$f_{vr}(\mathbf{T}) = \frac{1}{N_t} (\mathbf{T} - \mathbf{1} f_{av})^t (\mathbf{T} - \mathbf{1} f_{av}) + \underbrace{\lambda_{vr}^t (\mathbf{K} \mathbf{T} - \mathbf{Q})}_{=0} \quad (4.19)$$

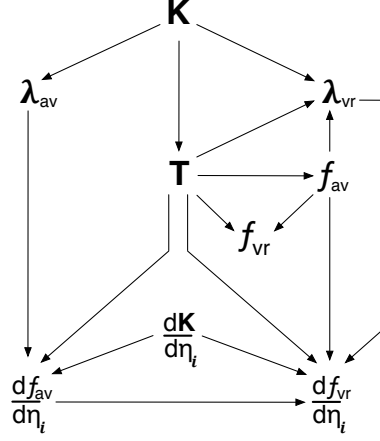


Figure 4.5: Antecedents required for evaluating sensitivity $df_{vr}/d\eta_i$ based on average temperature and its derivative with respect to η_i .

without modifying its value. It is worth noting that Eq. (4.18) relies on the average temperature established in Eq. (4.10) and that its adjoint vector has been renamed λ_{vr} . Following the same reasoning as in Subsection 4.3.3.1, assuming the independence of \mathbf{Q} and differentiating Eq. (4.19) with respect of η_i gives:

$$\frac{df_{vr}}{d\eta_i} = \left[\frac{2}{N_t} (\mathbf{T} - \mathbf{1}f_{av})^t + \lambda_{vr}^t \mathbf{K} \right] \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \eta_i} - \frac{2}{N_t} \frac{\partial f_{av}}{\partial \eta_i} \mathbf{1}^t (\mathbf{T} - \mathbf{1}f_{av}) + \lambda_{vr}^t \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \eta_i} \mathbf{T} \quad (4.20)$$

after factorizing the term $\partial \mathbf{T} / \partial \eta_i$. The adjoint equation working around the temperature derivative is:

$$\mathbf{K} \lambda_{vr} = -\frac{2}{N_t} (\mathbf{T} - \mathbf{1}f_{av}) \quad (4.21)$$

If adjoint variables λ_{vr} satisfy this equation, the sensitivity of temperature variance with respect to η_i is:

$$\frac{df_{vr}}{d\eta_i} = -\frac{2}{N_t} \frac{\partial f_{av}}{\partial \eta_i} \mathbf{1}^t (\mathbf{T} - \mathbf{1}f_{av}) + \lambda_{vr}^t \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \eta_i} \mathbf{T} \quad (4.22)$$

This equation is exactly based on the same derivative evaluation of $\partial \mathbf{K} / \partial \eta_{i,j}$, as the one introduced in the previous subsection.

Both Eqs. (4.21)-(4.22) lie on average temperature objective function and its sensitivity, assuming they have been previously calculated. Figure 4.5 shows each term needed to evaluate $df_{vr}/d\eta_i$ and gives details about their antecedents. From an algorithmic point of view, this scheme allows understanding the whole process in order to properly sequence the different evaluation steps, and consequently avoiding superfluous allocation of memory. For instance, the product $(\partial \mathbf{K} / \partial \eta_i) \cdot \mathbf{T}$ is required twice, but it is only stored once by the algorithm.

4.3.3.3 Additional comments on sensitivity analysis

At this point, the heat generation rate has been assumed homogeneous and not related to the design parameters η . This subsection introduces an additional corrective steps in order to link locally q and η , and therefore integrating the term $\partial \mathbf{Q} / \partial \eta_i$ to the sensitivity analysis process. Following the logic of SIMP method, the local law of variation taking place over the design parameter mesh is:

$$q(\eta) = q_0 + (q_p - q_0)\eta^p \text{ with } 0 \leq \eta \leq 1 \text{ and } p \geq 1 \quad (4.23)$$

where q_0 and q_p are the heat generation rates of k_0 and k_p materials. Assuming that $q_p = 0$ makes sense since the high conductivity material is added to the finite-size volume in order to cool it. According to this assumption, Fig. 4.6 shows the set of convex functions $q(\eta)$ for increasing penalization values p . Equation (4.23) penalizes the problem in the same way as Eq. (4.3): if $p \gg 1$, then $q_0 \gg (q_p - q_0)\eta^p$ for $0 \leq \eta < 1$, leading to $q(\eta) \approx q_0$. Consequently, while η does not equal to 1, the heat generation rate is close to its maximal value, penalizing any kind of objective function based on temperature reduction.

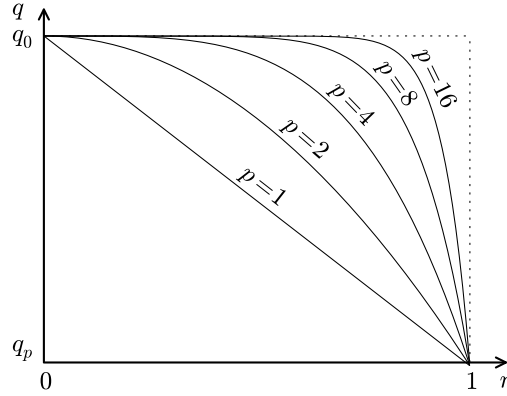


Figure 4.6: Influence of penalization parameter p on convex function $q(\eta)$ for $p = 1, 2, 4, 8, 16$.

As mentioned in Section 4.3.2, the thermal load vector \mathbf{Q} is built from local coefficients $S_u = \tilde{q}\Delta x\Delta y$, requiring to link the heat generation rate over the temperature control volume with the ones of the design parameter mesh q . Eqs. (4.7)-(4.8) with $N = 4$ allows averaging this rate, following the same logic as the evaluation of interfacial conductivities \tilde{k} . Figure 4.7a displays the direct impact of one design parameter $\eta_{i,j}$ on the 4 temperature control volumes surrounding it, following the same concept as in Fig. 4.4a. This relationship does not involve interfacial evaluations, making it more straightforward than the thermal conductivity assessment.

Before reduction, the sensitivity analysis in Eq. (4.12) requires to evaluate $\partial\mathbf{Q}/\partial\eta_i$. Following the chain rule derivative, this term is based on differentiating the local heat generation rate q :

$$\frac{\partial\mathbf{q}}{\partial\eta_{i,j}} = \begin{cases} p(q_p - q_0)\eta_{i,j}^{p-1} & \text{for } (i,j)^{th} \text{ element} \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad (4.24)$$

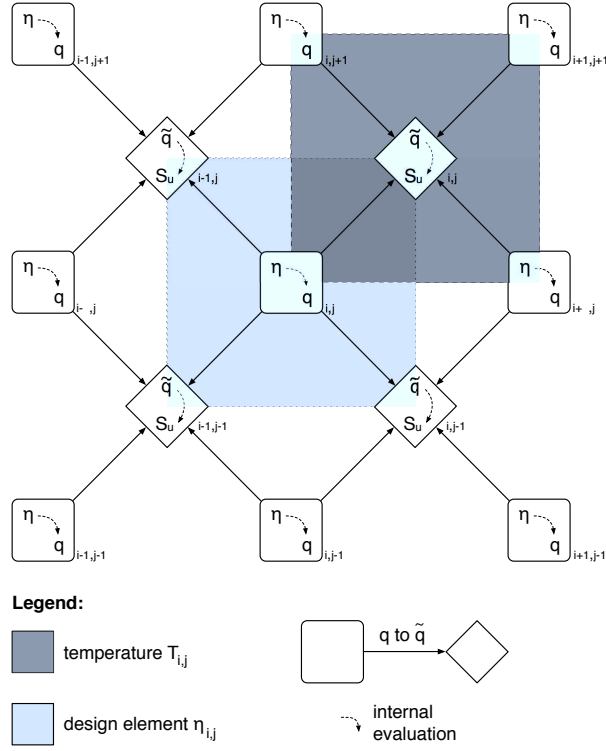
This result is exemplified thanks to Fig. 4.7b, showing that vector $\partial\mathbf{Q}/\partial\eta_{i,j}$ is only made of four nonzero elements, which can be written in its reduced form as:

$$\frac{\partial\mathbf{Q}}{\partial\eta_{i,j}} = \frac{\partial}{\partial\eta_{i,j}} \begin{pmatrix} S_u^{i-1,j-1} S_u^{i,j-1} & S_u^{i,j} & S_u^{i-1,j} \end{pmatrix}^t \quad (4.25)$$

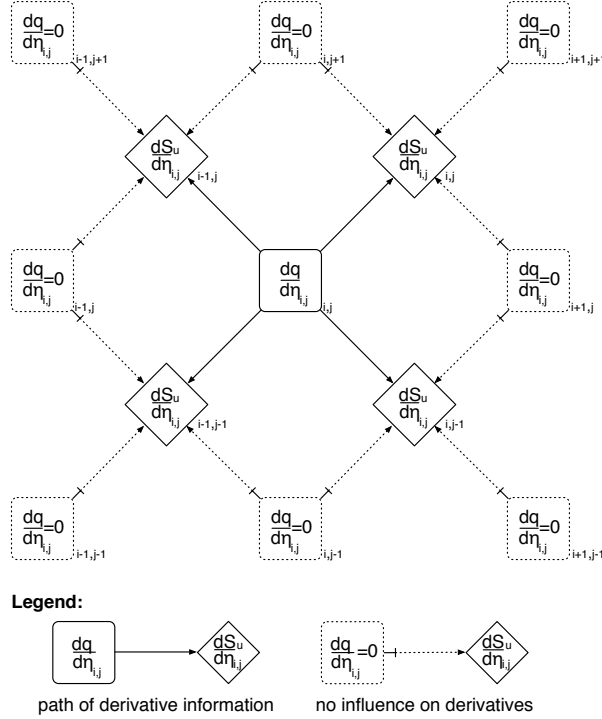
Consequently, if the heat generation rates are different in Ω_0 and Ω_p , the sensitivity of f_{av} and f_{vr} objective functions can be corrected by subtracting the product $\lambda^t \cdot (\partial\mathbf{Q}/\partial\eta_{i,j})$ to their respective expression Eq. (4.15) and Eq. (4.22), and where λ is respectively their average or variance adjoint vector in its reduced form.

Beyond the mathematical aspect, and due to the multiplicity of parameters such as numerical filters or heat generation rates, a test module has been developed, based on a finite difference method. It aims at performing the sensitivity analysis using a center scheme, such as:

$$\frac{df}{d\eta_i} \approx \frac{f(\eta_i + \Delta\eta) - f(\eta_i - \Delta\eta)}{2\Delta\eta} \quad (4.26)$$



(a) S_u evaluation from $\eta_{i,j}$ via heat generation rate averaging \tilde{q} .



(b) S_u derivative evaluation with respect to $\eta_{i,j}$ from $\partial q / \partial \eta_{i,j}$.

Figure 4.7: Direct and derivative evaluation of S_u coefficients.

where $\Delta\eta$ is small enough, typically with an order of magnitude of 10^{-4} , and f is one of the two objective functions. The sensitivity fields coming from both discrete adjoint and finite difference methods are checked against each other, especially for validating the processing of boundary conditions, which is beyond the scope of this article. This method is only performed for small design parameter fields including less than 20×20 elements because of its expensive calculation cost.

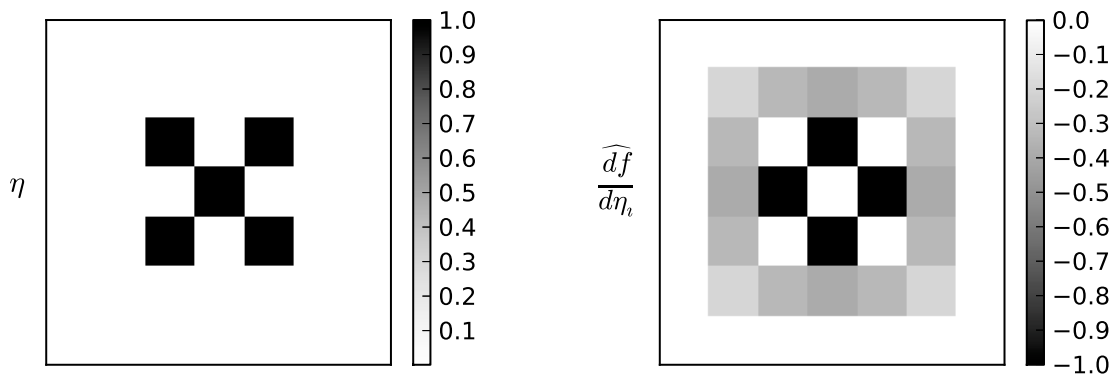
4.3.4 Sensitivity filter

As mentioned in Section 4.3.1.2, checkerboard problems are the main drawback of SIMP method. If a strategy involving a staggered grid is insufficient, a second valuable method preventing these non-physical structures filters the sensitivity field in order to attenuate its extreme values. As underlined by Bendsoe and Sigmund [2], this approach proved its relevancy in numerous cases, even though the optimization problem solved in this way is slightly ambiguous. Indeed, since the optimization algorithm does not rely on the regular gradient of the objective function but on its filtered form, it is difficult to state which problem is solved from Eq. (4.9).

The sensitivity filter is based on a discrete convolution product between sensitivity and design fields, defined as:

$$\widehat{\frac{df}{d\eta_i}} = \sum_{\ell=1}^N \eta_{\ell} H_{\ell} \frac{df}{d\eta_{\ell}} \bigg/ \eta_i \sum_{\ell=1}^N H_{\ell} \quad (4.27)$$

with ℓ looping over the N elements satisfying $\text{dist}(i, \ell) \leq r$ and where r is the radius of action of the sensitivity filter. Moreover, H is evaluated as $H_{\ell} = r - \text{dist}(i, \ell)$, making it maximal for the element where the filter is applied. The distance function is only based on grid indexes i and j , since both fields are discretized over a cartesian grid. Figure 4.8 shows in (a) a reduced checkerboard structure made of 5 elements, filtered thanks to the convolution product introduced in Eq. (4.27). For the purpose of this example, the non-filtered sensitivity field $df/d\eta_i$ is assumed to be homogeneous and negative, since slightly increasing any design parameter η_i leads to decrease the temperature average. Subfigure 4.8b displays the adimensionalized profile of the filtered sensitivity field, the 0 value corresponding to the initial homogeneous sensitivity. Filtering operation clearly enlarges the gradients of void elements of the checkerboard pattern, and consequently makes their impact larger within the optimization algorithm. As a result, this one tends to increase the thermal conductivity of these elements, since it seems their impact on objective function is valuable and consequently fills the "holes" of checkerboard.



(a) 7×7 design parameter grid featuring a checkerboard problem made of 5 design elements ($\eta = 1$). (b) Sensitivity values filtered with Eq. (4.27) and $r = 2$ from the above checkerboard problem and an homogeneous negative sensitivity field.

Figure 4.8: Impact of filtering on the sensitivity field in the frame of a reduced checkerboard problem.

4.3.5 Method of Moving Asymptotes (MMA)

The keystone of SIMP method, besides its penalization settings, is the numerical optimization method used for updating the design parameters $\boldsymbol{\eta}$. As highlighted in Fig. 4.2b, the Method of Moving Asymptotes requires the evaluation of both objective function and constraint, as well as their respective gradients, to create a local and convex approximation of the problem. Indeed, MMA belongs to a comprehensive class of optimization methods, based on conservative convex separable approximations (CCSA), which are intended for inequality-constrained nonlinear programming problems [122].

The evaluation of objective functions, and their gradients with respect to η_i , has been detailed in sections 4.3.3 and 4.3.4. The porosity $\phi(\boldsymbol{\eta})$, which is the main constraint of problem (4.9) can be directly computed with its derivative as:

$$\phi(\boldsymbol{\eta}) = \frac{1}{N_\eta} \mathbb{1}^t \boldsymbol{\eta} \Rightarrow \frac{d\phi}{d\eta_i} = \frac{1}{N_\eta} \quad (4.28)$$

Considering an iteration k at point $\boldsymbol{\eta}^k$, a local convex subproblem is formulated and is solved thanks to a primal-dual point interior method. Solving this subproblem leads to a new point $\boldsymbol{\eta}^{k+1}$, where the objective function, constraint and gradients should be calculated again. The strength of MMA lies on its asymptotes which determine the accuracy of the subproblem approximation, and their relative position in relation to $\boldsymbol{\eta}^k$ is adapted during the convergence process.

As emphasized by Bendsøe and Sigmund in [2], MMA has been recognized to have better convergence abilities than classical optimization methods such as Sequential Quadratic Programming (SQP). It manages to avoid the main local optima while ensuring a fast convergence speed, thanks to the rules updating the mobile asymptotes. Moreover, the implementation performed for this article easily allows adding new constraints without deeply modifying the source code and limits computer memory usage.

4.4 Multi-objective optimization

Section 4.3.4 introduced two different objective functions based on average and variance temperature, respectively named f_{av} and f_{vr} . In bi-objective optimization, the challenge is to simultaneously take advantage of both objective functions, *i.e.* considering a trade-off from these two criteria leading to a not unique solution. Regarding average and variance temperature reduction, a trade-off means that further minimization of average temperature involves to increase temperature variance, and conversely. The set of solutions that requires a trade-off to be improved is well-known as the Pareto front, which has been defined by Cohon [123] as:

A feasible solution to a multi-objective programming problem is Pareto optimal if there exists no other feasible solution that will yield an improvement in one objective without causing a degradation in at least one other objective

From a numerical point of view, the challenge is to build an algorithm able to explore the Pareto frontier and such methods are available in dedicated scientific literature. Only a few are suitable in the frame of topology optimization, since their implementation is very time consuming, in addition to the computational cost of SIMP and MMA methods. In the frame of the problem tackled through this study, the bi-objective problem has been reduced to an Aggregate Objective Function (AOF), which is based on a linear combination of both objective functions, also known as the weighted-sum approach:

$$f_{bo} = w f_{av} + (1 - w) f_{vr} \quad (4.29)$$

where w is the scalar-valued weight ranging from 0 to 1. The f_{bo} sensitivity can be straightforwardly evaluated as:

$$\frac{df_{bo}}{d\eta_h} = w \frac{df_{av}}{d\eta_h} + (1 - w) \frac{df_{vr}}{d\eta_h} \quad (4.30)$$

Each value w provides a different solution balancing the minimization of average or variance temperature, leading to test different values to reach a structure satisfying the decision maker. Thanks to high parallelization abilities, calculations including a set up to 101 different weights are conjointly run in order to capture the Pareto frontier, working around the expensive computational time of this method.

Nevertheless, accurately solving a multi-objective problem by means of AOF depends on two main conditions:

1. As fully detailed and illustrated in the dedicated literature review made by Athan and Papalambros [124], this method can only generate the convex part of the Pareto frontier. For the purpose of this study, convexity is assumed and will be checked *a posteriori*.
2. In order to reach an homogenous distribution of samples along the Pareto frontier, both objective functions have to be rescaled to have the same order of magnitude [125]:

$$\hat{f} = \frac{f - \underline{f}}{\overline{f} - \underline{f}} \quad (4.31)$$

where f is respectively f_{av} and f_{vr} . The other 4 parameters are determined by successfully solving the optimization problem (4.9) for f_{av} and f_{vr} : minimizing f_{av} with respect to the maximal porosity provides \underline{f}_{av} and \overline{f}_{vr} , whereas minimizing f_{vr} brings the values of \underline{f}_{vr} and \overline{f}_{av} . In other words, the points $(\underline{f}_{av}, \overline{f}_{vr})$ and $(\overline{f}_{av}, \underline{f}_{vr})$ determine the extrema of Pareto frontier and the rescaled objective functions range between 0 and 1.

By way of conclusion, it is worth noting that AOF requires a two-step approach: the pre-processing part that aims at calculating the rescaling parameters and the solver that runs several instances of the same calculation with different weightings w .

4.5 Results

This section introduces the results and has been divided into three categories: at first, a global overview of SIMP method is provided, with a specific investigation about the penalization parameter in a frame of a mono-objective case. Secondly, the influence of main numerical parameters is studied, such as mesh independence analysis, and thirdly, a full multi-objective optimization problem is examined.

4.5.1 Convergence process

Calculations have been run under the assumptions made in Section 4.3.1 and the strategy introduced in Fig. 4.2b. The design grid includes 200×100 elements taking place in the upper part of the calculation field, the lower part being reflected from the axis of symmetry. In addition, the maximal porosity allowed $\overline{\phi}$ is 10% for this section. An harmonic numerical filter is used in conjunction with a sensitivity filter operating with a radius of $r = 1.5$ mesh size. The results have been established for f_{av} objective function and the main penalization steps are shown in Fig. 4.9, the grey areas picturing the symmetrical parts of the field. The structure is initialized with an homogeneous design parameter field, such as $\eta_{i,j} = 0.05$, leading to a full black & white design using all the available k_p material, as displayed in Fig. 4.9d.

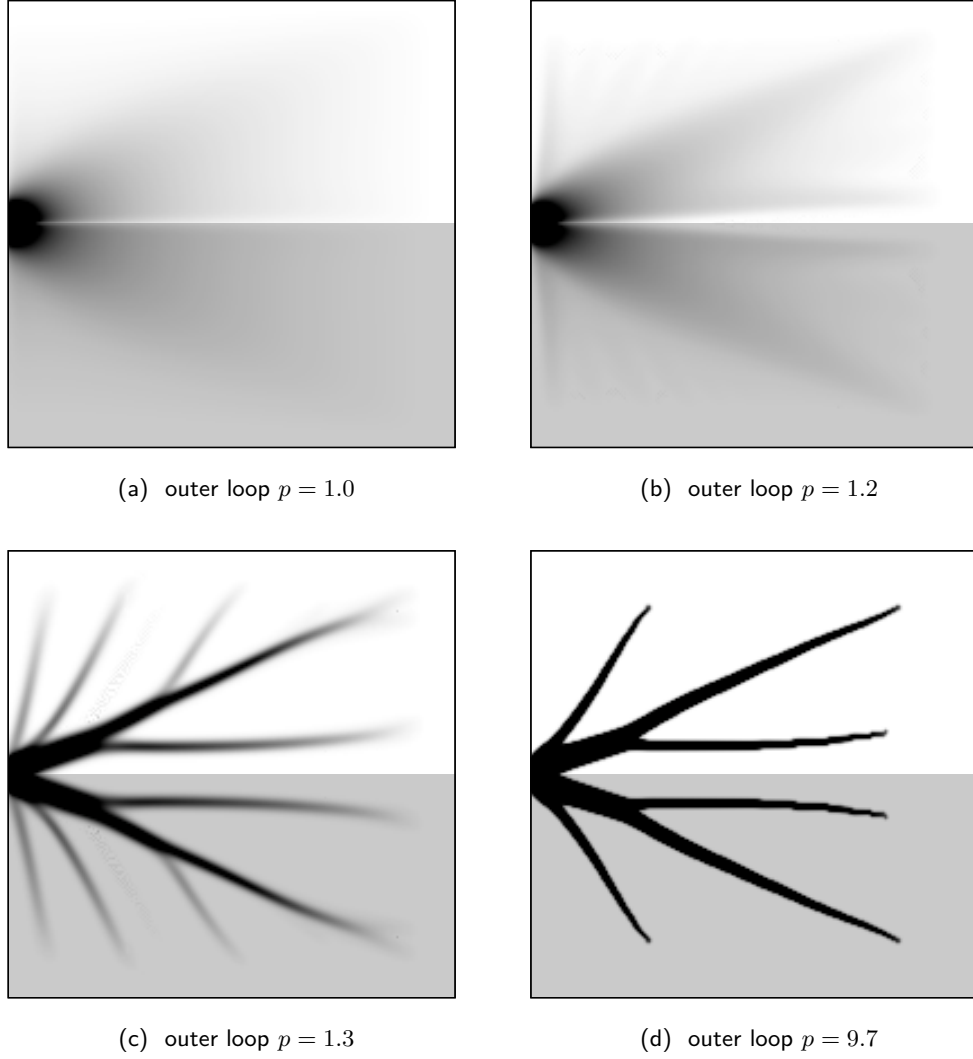
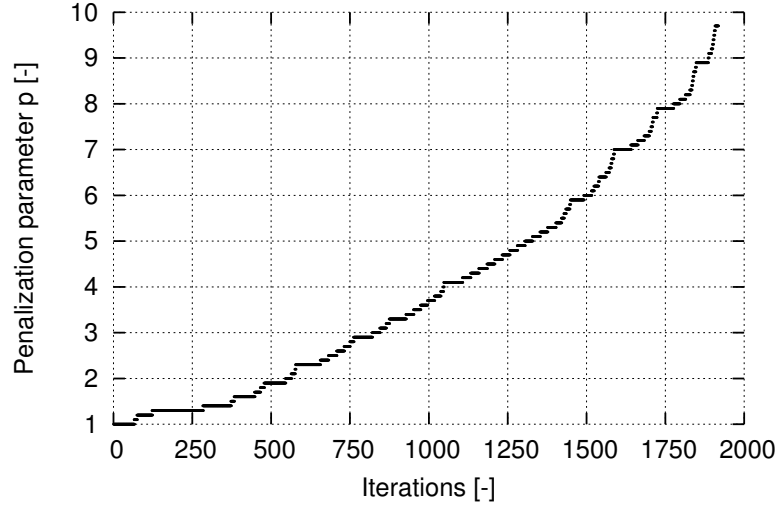


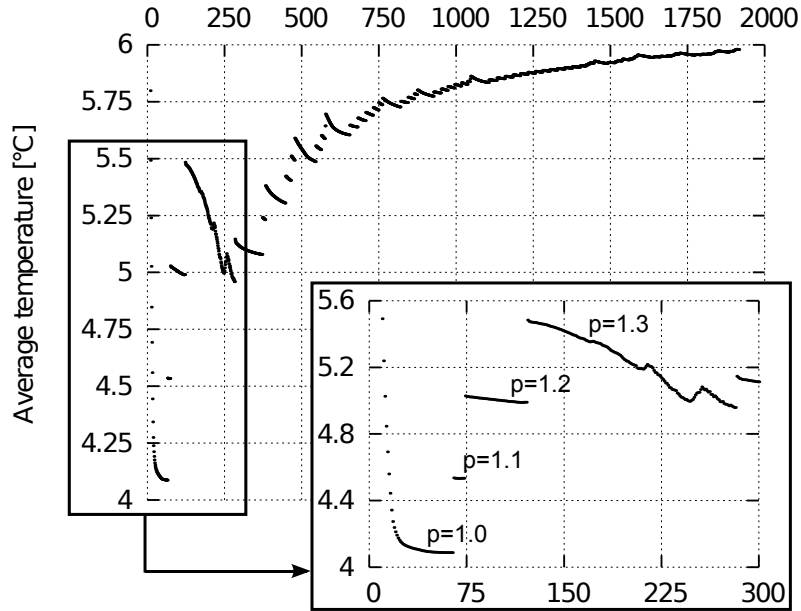
Figure 4.9: Results of main penalization steps during the optimization process: f_{av} minimization, harmonic filter, $\bar{\phi} = 10\%$, $q_0 = q_p = 10 \text{ kW/m}^3$, $r = 1.5$.

Figure 4.10a shows the value of penalization parameter p for each outer loop iteration, which increases of $\Delta p = 0.1$ when the iterative process of inner loops stops. It clearly appears that different numbers of inner iterations are required to converge: for instance, $p = 1.3$ involves at least 150 steps which is definitely lower than $p = 1.1$. In addition, Fig. 4.10b displays the evolution of f_{av} values in similar conditions, with an enlargement regarding the first 4 penalization steps. The gap between the end of two segments picturing two outer loops corresponds to the outer residual ϵ_o defined in Fig. 4.2b: when $\epsilon_o < 10^{-3}$, after roughly 2000 iterations, the optimization process stops.

The main point highlighted by Fig. 4.10b shows that the best average temperature reduction is reached without penalization ($p = 1.0$): this structure is not a 1 – 0 design as displayed in Fig. 4.9a. Each increasing of penalization parameter is detrimental to the objective function, while making the structure converging toward a discrete design. In other words, the best structure is made of a gradient of k_p material spreads out through the whole finite-size volume, with the highest concentration of high conductivity material around the heat sink location. A similar behavior is observed in structural mechanics optimization when using SIMP method [2]. From a thermodynamical point of view, porous structures are optimal for minimizing the entropy generation rate over the calculation field. Indeed, the interface between two materials having a significant difference of thermal conductivity creates a



(a) Penalization parameter p : each stage pictures a set of inner loops.



(b) Objective function f_{av} : each segment pictures a set of inner loops with a constant penalization.

Figure 4.10: Evaluation of penalization parameter and objective function for each iteration step.

local temperature gradient, and therefore increases the local entropy generation rate. Consequently, removing the bi-material interfaces from the finite-size volume decreases the global entropy generation rate.

Another feature underlined by Fig. 4.10b is the opposite orientation of penalization and optimization processes. Each inner loop strives for minimizing the objective function at a constant parameter p , but the global tendency increases because of the outer penalization parameter increment. Considering the inner loops characterized by $p = 1.3$ on Fig. 4.10b, the Method of Moving Asymptotes decreases the objective function value, avoiding two local optima. Indeed, this step is crucial since the structure starts from a design field mainly porous to reach a first layout of the final high conductivity network, as displayed on Fig. 4.9b and Fig. 4.9c. Except this specific step, the other penalization levels have a straightforward behavior: it mainly consists of assembling the k_p material remaining in

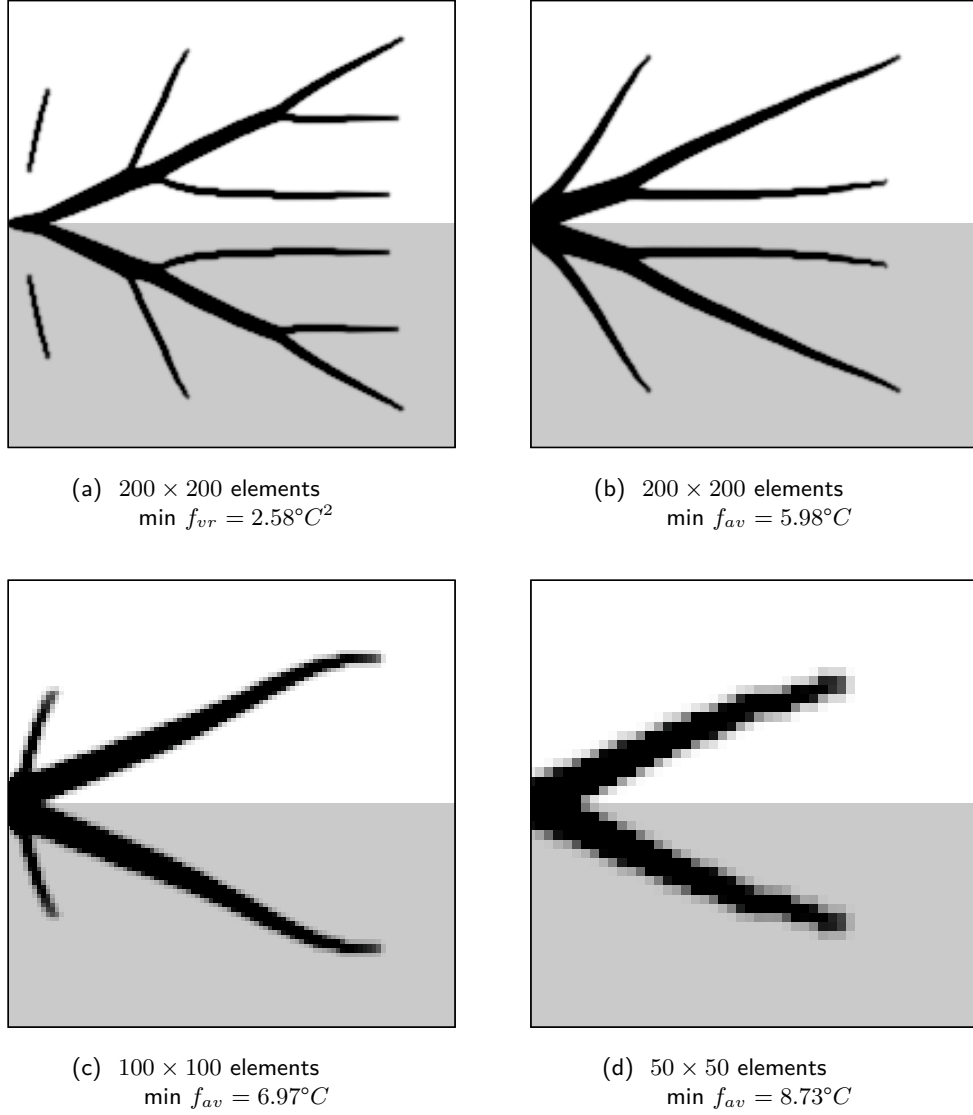


Figure 4.11: Comparison of f_{av} and f_{vr} minimization and mesh independence analysis: harmonic filter, $\bar{\phi} = 10\%$, $q_0 = q_p = 10 \text{ kW/m}^3$, $r = 1.5$.

the porous areas along the high conductivity structure.

The above analysis can also be led by considering a reduction of temperature variance and Fig. 4.11 compares the structure reached in both cases. Even though they share the same V-shape connected to the heat sink, two fundamental differences exist:

- In the frame of average temperature minimization, an important quantity of k_p material is cumulated around the heat sink and the structure becomes thinner when moving back from this one. By contrast, f_{vr} reduction leads to a high conductivity layout that has a more homogeneous thick along its network.
- The main difference lies on the structural discontinuity of the variance configuration displayed on Fig. 4.11a, compared to the uninterrupted connection of k_p elements of Fig. 4.11b. In the absence of these discontinuous structures, two vertical temperature gradients take place between the heat sink and the northern and southern areas. Therefore, the two discontinuous high conductivity strips allow draining the heat flux towards the heat sink, without evacuating

it. Indeed, if those were linked to the main k_p structure, both temperature gradients would appear again because the heat flux could follow the high conductivity path as far as the heat sink, and it consequently would not contribute to make homogenous the temperature field.

These two examples show the potential of SIMP approach, and especially the self-creation of discontinuous structures without any setting to drive the optimization algorithm towards this solution. Moreover, in the frame of multi-objective optimization, the AOF method puts the structures coming from f_{av} and f_{vr} minimization in competition with each other. In other words, structures favoring external heat transfer through the heat sink compete over high conductivity networks aiming at supporting internal heat transfer.

4.5.2 Influence of numerical parameters

4.5.2.1 Mesh independence analysis

SIMP method is highly dependent of the design element size, due to the nature of its parametrization based on a design grid having the same order of magnitude as the one used in FVM. Consequently, the level of details reached can not be higher than the grid size. In the frame of temperature average reduction, the best solution is to link each element with the heat sink [83], leading to a high conductivity structure with many thin branches if no numerical mechanism limits the size of the smallest scale. Figures 4.11b, 4.11c and 4.11d show three structures evaluated from the same numerical assumptions but using respectively 200×200 , 100×100 and 50×50 design elements. At first, the elementary V-shape does not vary in function of the mesh number and, secondly, the more the mesh is refined, the more second scale structures appear along the elementary layout.

The objective function value decreases from $8.73^\circ C$ to $5.98^\circ C$ when the mesh size is refined from 50×50 to 200×200 elements, as shown in the diagonal of Tab. 4.1 (bold number). This reduction is due to the concurrence of two causes that are indivisible: on the one hand, the mesh refinement makes the discretization of heat partial differential equation more accurate, and consequently improves the evaluation of f_{av} . On the other hand, smaller design grids allow reaching more elaborate structures having better thermal performances. For a specific structure, two errors are defined to evaluate the order of magnitude of each phenomenon, respectively E_d and E_s , based on:

$$E = \frac{f - f_{ref}}{f_{ref}} \quad (4.32)$$

where:

- E_d stands for the discretization error: it is evaluated as the relative difference between the minimized objective function and the reference value that comes from the same k_p layout but refined with 201×201 temperature control volumes. A comparison of E_d values only matches within a column of Tab. 4.1 and f_{ref} is consequently provided by its lower cell.
- E_s stands for the structural error which reflects the influence of design mesh size on the geometrical features reached by k_p structures. For making an accurate comparison, the relative difference between both objective functions is calculated with the same number of temperature control volumes. Therefore, E_s is evaluated within a row of Tab. 4.1 and f_{ref} is provided by its last cell.

At first, it clearly appears that the discretization error E_d becomes smaller as the number of elements of temperature grid increases, which is a result expected from the dedicated literature review [96]. Secondly, the order of magnitude of structural error E_s is at least 10 times larger than the discretization one. Consequently, the only reasonable conclusion is to use the thinnest grid size as possible, namely 200×200 design elements, not to minimize the discretization error but to reach highly detailed structures.

| Grid size | | design | | |
|-------------|--------------------------|-------------|-------------|-------------|
| temperature | | 50 × 50 | 100 × 100 | 200 × 200 |
| 51 | f_{av} [$^{\circ}C$] | 8.73 | | |
| × | E_d [%] | 4.68 | - | - |
| 51 | E_s [%] | 0.0 | | |
| 101 | f_{av} [$^{\circ}C$] | 8.39 | 6.97 | |
| × | E_d [%] | 0.60 | 1.31 | - |
| 101 | E_s [%] | 20.4 | 0.0 | |
| 201 | f_{av} [$^{\circ}C$] | 8.34 | 6.88 | 5.98 |
| × | E_d [%] | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 201 | E_s [%] | 39.5 | 15.1 | 0.0 |

Table 4.1: f_{av} objective function value and their corresponding E_d and E_s error: light grey column picture E_d evolution, whereas dark gray raw emphasizes E_s evolution.

4.5.2.2 Numerical filter analysis

Gesborg-Hansen *et al.* have investigated the influence of numerical filters on the high conductivity structures reached by SIMP method involving FVM [59]. Role and definition of both filters are detailed in Subsection 4.3.2 and Eqs. (4.7)-(4.8). Figures 4.12b and 4.12c shows two structures built under the same assumptions, but using respectively harmonic and arithmetic filters. Structurally, no major difference is observed: both structures have V-shape including a total of six branches. However, the fork of the two middle branches is slightly shifted back from the heat sink in the case of harmonic filter, but without modifying the overall appearance of structures. These observations are in agreement with the ones made in [59].

The difference of objective function values can be explained by the difference of discretization schemes, as well as the geometrical difference of final structures. A more accurate comparison can be made by evaluating the structures reached with the opposite numerical filter. For instance, if the result shown in Fig. 4.12c is evaluated with an harmonic filter, the objective function value increases up to $6.34^{\circ}C$ which is higher than the structure directly optimized with this filter. Conversely, the result in Fig. 4.12b reaches an average of $5.39^{\circ}C$ with an arithmetic filter, slightly higher than the optimized value. In both cases, the objective function evaluated from the opposite filter are higher than the one coming from the optimization process, which is an expected result.

4.5.2.3 Sensitivity filter analysis

This subsection aims at qualifying the influence of sensitivity filter, from the convolution product defined in Eq. (4.27). Figures 4.12e and 4.12f shows two structures minimizing the temperature variance with and without using the sensitivity filter. These results confirm the ones available in the dedicated literature review [2]: the smallest thickness of k_p material is directly limited by the radius r of the convolution product. Indeed, Fig. 4.12e has thinner branches than Fig. 4.12f, especially for the two middle forks. Moreover, the sensitivity filter creates a small gradient of k_p material along the high conductivity structure, having also the same order of magnitude as the radius r . In conclusion, using a sensitivity filter may prevent the creation of checkerboard patterns (especially for numerical arithmetic filter), but may also aggregate locally the smallest structures together. Therefore, the destruction of the smallest scales modifies the objective function, increasing it from $1.72^{\circ}C^2$ to $2.58^{\circ}C^2$.

Furthermore, the sensitivity filter is also used in this study to manage properly the boundary conditions. Even though this point is behind the scope of this article, some precautions for evaluating the convolution product along the edges of the finite-size volume have been taken to ensure that design boundary conditions are well-considered. By way of example, Figs. 4.12b and 4.12a shows the

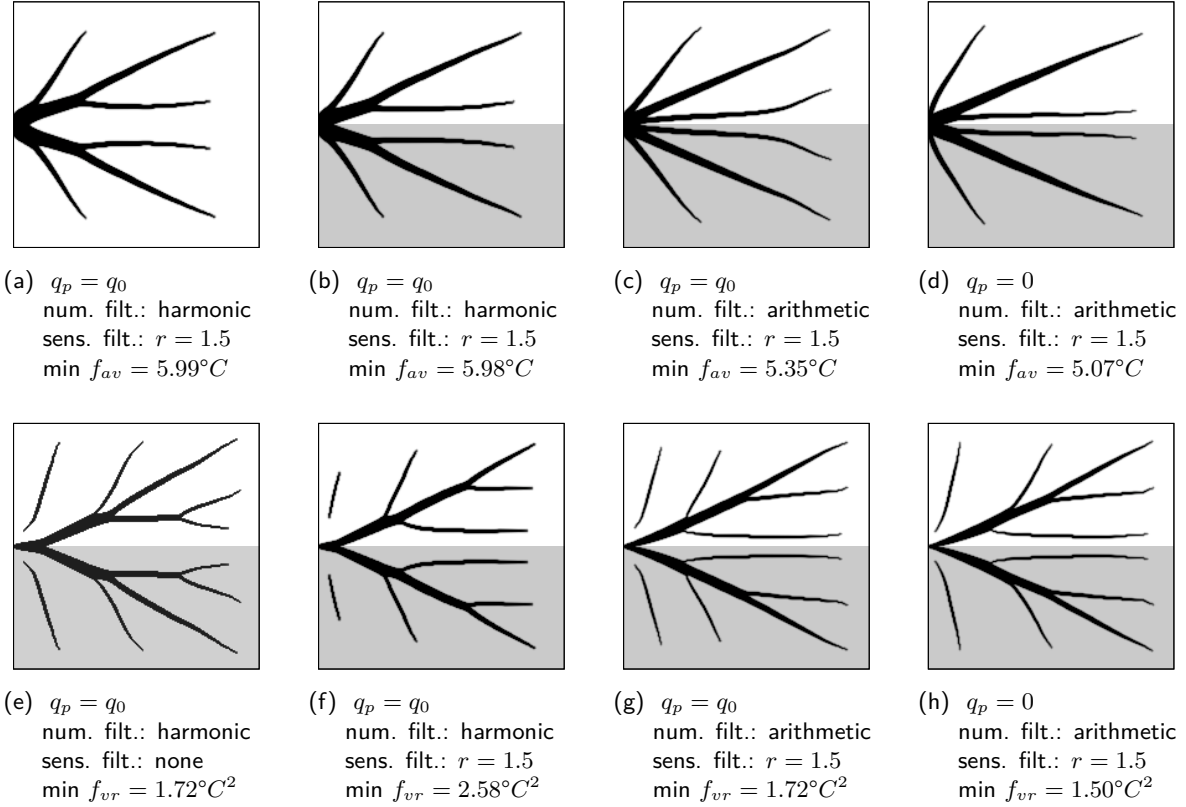


Figure 4.12: Analysis of SIMP results for $\bar{\phi} = 10\%$, $q_0 = 10 \text{ kW/m}^3$ and 200×200 elements. The gray areas display the lower part of k_p structures built from a symmetrical boundary condition.

behavior of k_p structures evaluated with or without a symmetrical condition along the x -axis. In other words, Fig. 4.12a has been reached with calculations carried out over the whole domain Ω , leading to double the number of elements involved in Fig. 4.12b and consequently increasing its computational cost. From a physical point of view, both structures should structurally remain the same, irrespective of using or not a symmetrical boundary condition. This behavior is well-established, even though the numerical errors, as well as slightly different final penalization parameters, lead to infinitesimal variations of structures and function objective minima: $f_{av} = 5.98^\circ C$ and $5.99^\circ C$ respectively with and without a symmetrical boundary condition.

4.5.2.4 Influence of heat generation rate

The influence of heat generation inside k_p material has been discussed in [98]: its impact on objective function is studied in the frame of constructal theory, but without tackling its influence on structural design. Subsection 4.3.3.3 introduced the modifications required by the sensitivity analysis to take into account different heat generating rates for q_p and q_0 . The most realistic case to consider is $q_p = 0$, since k_p material is added in order to cool the finite-size volume and it consequently should not generate heat.

Some structures in fig. 4.12 allow making a comparison of average and variance temperature reductions for $q_p = q_0$ (3rd column) and $q_p = 0$ (4th column). At first, both objective functions are lower without q_p heat generation rate, which is in agreement with physical sense. Secondly, the structural changes induced are insignificant:

- For average temperature reduction, structures 4.12c and 4.12d only differ from the final inclination of the two central branches.

- For temperature variance minimization, the only difference between structures 4.12g and 4.12h lies on the slightly larger gap between the two superior branches (and consequently the two inferior ones).

Therefore, q_p heat generation rate has very few consequences on the optimal structural design, even though the objective function values are not similar due to the lower thermal load. However, structures with higher porosity constraint $\bar{\phi}$ should have more consequent structural differences due to the larger variation of generated heat.

4.5.3 Multi-objective results

This section investigates the results of bi-objective optimization problem introduced in Section 4.4, as well as the influence of $\bar{\phi}$ on the objective function vector (f_{av}, f_{vr}) . For each porosity constraint of respectively 10%, 12.5%, and 15%, multi-objective optimizations have been led by discretizing $w \in [0, 1]$ in Eq. (4.29) with 101 elements, after rescaling each objective function according to Eq. (4.31). Figure 4.13 displays a few results, sorted by porosity and weighting:

- Each row displays the structures reached from the 3 porosity constraints, with a constant weighting w . Concretely, adding k_p material leads to strengthen the main V-shape, while adding new smaller scales to the existing high conductivity paths. Indeed, this additional material mainly allows creating several new forks in order to reach higher level of structural details, as detailed in Figs. 4.13a and 4.13c for instance.
- Each column shows the evolution of weightings w from 0 to 1, *i.e.* respectively from minimizing f_{vr} to f_{av} , with a constant porosity constraint. The main point is structural: the discontinuities existing for f_{vr} structures ($w = 0$) are quickly reattached to the main skeleton, as clearly underlined by Figs. 4.13c and 4.13f. Furthermore, as highlighted in Subsection 4.5.1, a transfer of k_p material occurs along the x-axis: from a roughly homogeneous state for $w = 0$, an accumulation is progressively created around the heat sink for $w = 1$.

Multi-objective optimization also aims at identifying the Pareto frontier, as introduced in Section 4.4 and shown in Fig. 4.15. The Pareto frontiers are the subsets made of non-dominated solutions, which are reached from AOF methods, for a constant porosity. As underlined in the previous section, only the convex parts are pictured due to the method used: this behavior is particularly obvious for the Pareto frontier subject to $\bar{\phi} = 10\%$ (○) that includes non-defined sections corresponding to non-convex subsets. Only the non-dominated solutions actually reaching one of the Pareto frontiers are displayed over the 101 different weightings used through this study. It is worth noting that the more the porosity constraint increases, the more the whole set of solutions is closed to the Pareto frontiers: indeed, structures with large porosity constraints are less sensitive to local optima due to the low variations of the objective function according to small structural changes, making them easier to avoid.

Conversely, the lower the maximal porosity is, the more the optimization process does not success to avoid local minima. These appear for $\bar{\phi} = 10\%$ when minimizing f_{bo} with $w = 0$ and f_{vr} , explaining why Figs. 4.13a and 4.12g are different, whereas they have been established from the exact same numerical parameters. In the first case, the objective function has been rescaled following Eq. 4.29 whereas the second case is built from a direct evaluation of the objective function. Consequently, both residuals ϵ_i and ϵ_o in Fig. 4.2b do not behave in the same way, leading to inner and outer loops with different iteration numbers. Therefore, longer iterative cycles perform better than shorter ones to avoid local optima and leads to small structural changes, as emphasized in Fig. 4.14. Since the rescaled objective function is lower than the direct one, better performances are expected from it, which is confirmed by making a comparison between the objective function values

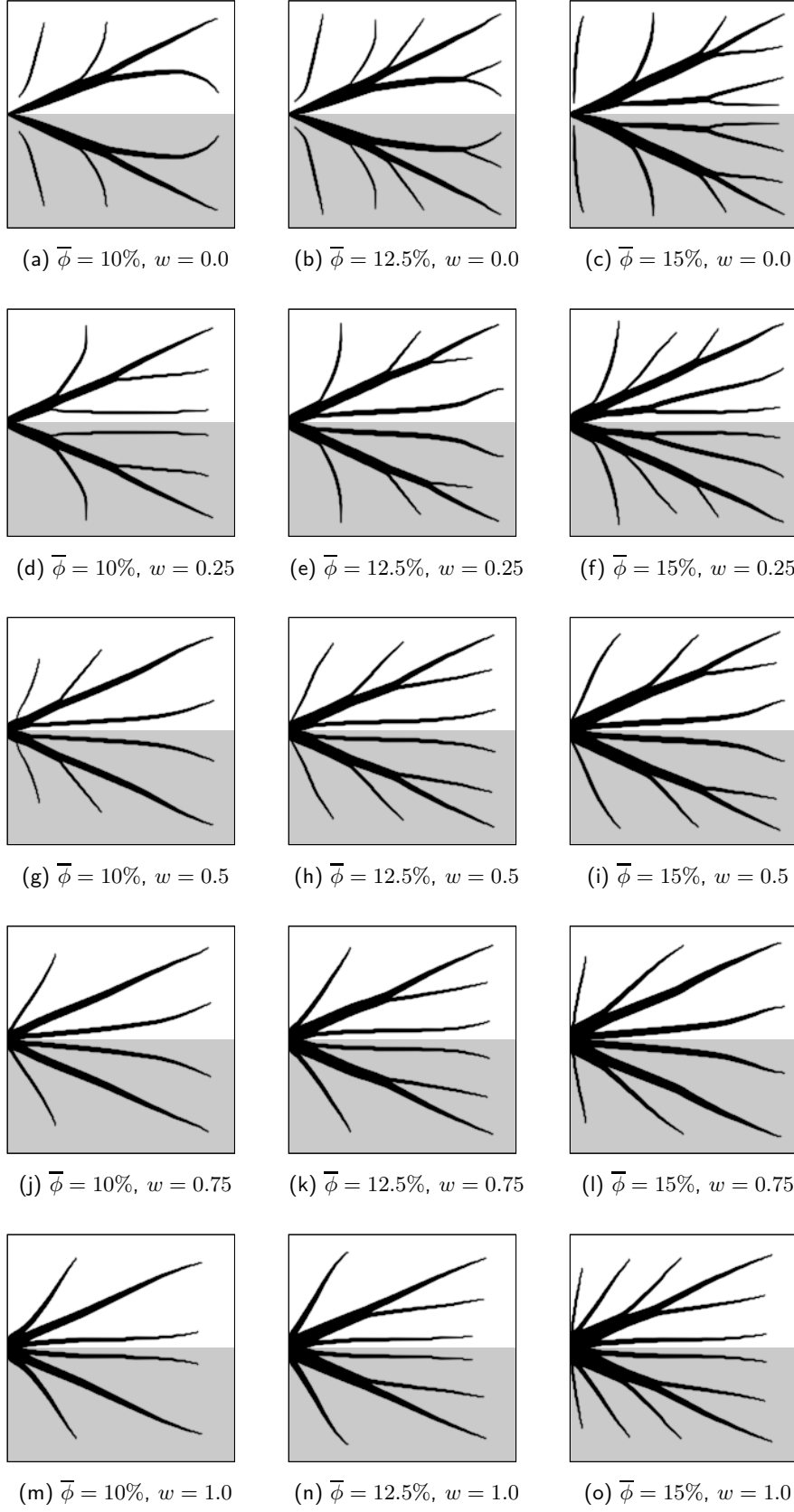


Figure 4.13: Samples of high conductivity structures from (f_{av}, f_{vr}) minimization, sorted by porosity $\bar{\phi}$ (column) and weighting w (row). Results are evaluated from arithmetic numerical filter, $q_0 = q_p = 10 \text{ kW/m}^3$ and $r = 1.5$.

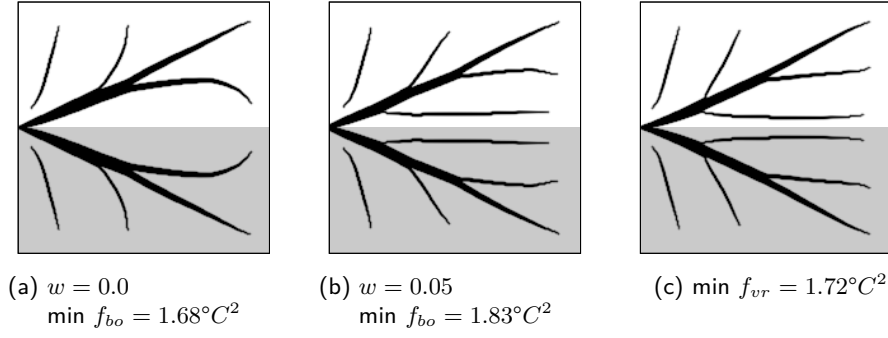


Figure 4.14: Influence of local optima: arithmetic filter, $\bar{\phi} = 10\%$, $q_0 = q_p = 10 \text{ kW/m}^3$, $r = 1.5$.

of Figs. 4.14a and 4.14c ($|f_{vr} - f_{bo}| = 0.04^\circ C$). However, minimizing f_{bo} with $w = 0.05$ leads again to a configuration close to the one having a local minimal, as displayed in Fig. 4.14b. Indeed, for $w \leq 0.1$ and $\bar{\phi} = 10\%$, the solutions reached structurally belongs to one or the other configuration, emphasizing the difficulty to properly avoid local optima within the sensitive context of low porosity and temperature variance minimization.

From a thermal point of view, Fig. 4.15 also underlines the influence of porosity $\bar{\phi}$ on the optimal solutions. Adding k_p material decreases both objective functions f_{av} and f_{vr} , leading to shift the Pareto frontiers towards the origin of its basis. This transformation takes place inside the white area in Fig. 4.15, since both limits of Pareto frontiers stand for the single objective minimization of f_{av} or f_{vr} : these two values decrease when enlarging the porosity constraint, constricting the front within a smaller space. In the end, it is possible to consider a continuous transformation of a Pareto front by gradually shifting as a function of the porosity constraint.

However, the fundamental point highlighted by Fig. 4.15 is the optimality of a few solutions, thanks to the convex shape of Pareto frontier. For each front, the weightings around $w = 0.5$ provide structures having both f_{av} and f_{vr} minima close to their single objective minimization: this behavior is obvious for $\bar{\phi} = 15\%$ (\bullet), where $f_{av} = 4.0^\circ C$ and $f_{vr} = 0.97^\circ C^2$, compared with their respective single objective value $\underline{f_{av}} = 3.9^\circ C$ and $\underline{f_{vr}} = 0.74^\circ C^2$. In other words, this configuration takes advantage of both structures optimized with $w = 0$ and $w = 1$, as shown in Fig. 4.13i. Even though the solution is structurally similar to 4.13o, the main difference lies on the suppression of the second top branches from the heat sink location.

The Pareto fronts in Fig. 4.15 allows tackling the multi-objective problem from another point of view as well. Knowing the shape of the Pareto frontier at a given $\bar{\phi}$, for instance $\phi = 15\%$ (\bullet), it clearly underlines that reaching a cooling point outside its Pareto set is only possible with two complementary strategies:

- increasing the porosity in order that the new Pareto frontier intersects with the wished operating point;
- while keeping the same maximal porosity, *i.e.* 15% in this case, a satisfying solution can be addressed by using porous high conductivity network showing better thermal performances, as detailed in subsection 4.5.1. This can be achieved by considering the calculation is converged when penalization parameter p reaches a maximal value, typically 1.5.

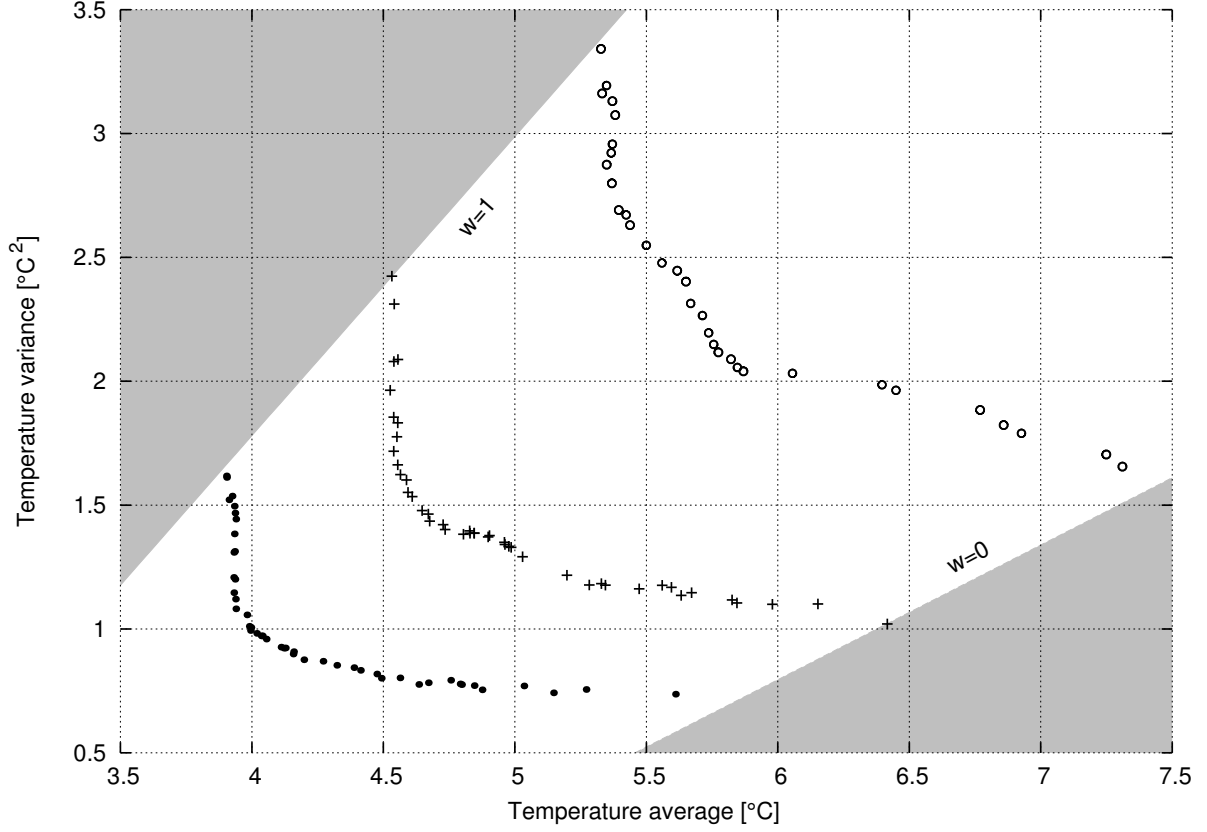


Figure 4.15: Pareto frontiers of (f_{av}, f_{vr}) minimization problem established for 3 different porosities: $\bar{\phi} = 10\%$ (○), $\bar{\phi} = 12.5\%$ (+) and $\bar{\phi} = 15\%$ (●). Results are evaluated from arithmetic numerical filter, $q_0 = q_p = 10 \text{ kW/m}^3$ and $r = 1.5$.

4.6 Conclusion

Several realistic engineering problems require to minimize the average temperature, while the hot temperature spots are reduced as well: for instance, this is a pivotal problematic of glassware manufacturers regarding the interior temperature field of moulds that should have low working temperature and also require homogeneous temperature field for quality purposes. However, before tackling these classes of problems, some limitations of this study must be overcome, such as the possibility of using convective boundary conditions or modeling complex tridimensional geometries.

The present article introduces several new developments for solving the VP conductive problem. At first, sensitivity analysis for variance temperature reduction is developed and the links with average temperature objective function are provided in order to make an efficient coupling between them. Secondly, a new extension of the existing SIMP parametrization has been implemented to tackle variations of heat generation rates between both materials. The calculations have shown that for a low porosity constraint, the structural differences are insignificant between structures having or not a q_p heat generation rate. Thirdly, SIMP method has been coupled with AOF strategy thanks to parallel calculation abilities. Regarding the results, this is a valid approach for tackling bi-objective conductive problems, especially in the frame of f_{av} and f_{vr} minimization.

From a physical and mathematical point of view, the Pareto fronts include solutions showing acceptable trade-offs between the objective functions, *i.e.* with f_{av} and f_{vr} values close to their respective single objective minimum: the convex nature of each Pareto set illustrates this main point. It is worth noting that structures having a satisfying trade-off can be directly reached using $w = 0.5$

after rescaling each objective function. Moreover, the Pareto front moves depending on porosity constraint within two lines plot from its extrema values $w = 0$ and $w = 1$. By extrapolation from these results, it may be possible to characterize each point inside this cone thanks to a weighting and a porosity constraint: consequently, defining the average and variance temperature allowed reaching a solution minimizing the high conductivity material used.

Some investigations have been successfully led to consider structures having the same thermal conductivity, but differing from their heat generation rate. By inverting the optimization problem and maximizing the average temperature, it is possible to find the best layout of heat generating material to warm up the whole finite-size volume. However, some details of this approach are currently under investigation and these results are beyond the scope of this article. A few additional calculations have also underlined the importance of ratio k_p/k_0 on the structural design of solutions and further investigations should have a deeper analysis of its influence. In the future, research should also consider optimizing structures including more than two materials, for instance finding the optimal shape of k_0 and k_p materials, as well as the position of some holes within the calculation field.

4.7 Remarques complémentaires

Cette section aborde trois points complémentaires à l'article présenté ci-dessus. D'une part, le traitement des conditions limites lors du filtrage de la sensibilité est abordé, afin d'éviter les effets de bord indésirables. D'autre part, une pseudo-croissance du matériau hautement conducteur est considérée, pour déterminer s'il est possible d'envisager une déformation continue et progressive de la structure en augmentant progressivement la porosité. Enfin, la méthode SIMP est appliquée à deux configurations géométriques et physiques différentes de celle examinée jusqu'à ce stade.

4.7.1 Conditions limites du filtre numérique

Le produit de convolution entre les variables de contrôle et la sensibilité, permettant de réaliser le filtrage de cette dernière afin d'éviter la formation des *checkerboards*, est présenté dans la sous-section 4.3.4 et plus particulièrement dans l'équation (4.27). Les figures 4.16a et 4.16b présentent des structures obtenues en minimisant la moyenne de température à partir des mêmes configurations physiques et géométriques, avec un rayon de filtrage de la sensibilité $r = 1, 5$. La première solution est évaluée sur le domaine complet, tandis que la seconde utilise l'axe de symétrie centrale afin de réduire le nombre de variables impliquées. Les solutions établies avec et sans l'utilisation de la condition de symétrie ont des performances similaires, mais, contrairement à toute attente, divergent radicalement en terme de structure, les dendrites centrales étant jointes ou disjointes selon les cas. Différents calculs ont montré que la raison de cette modification réside dans le traitement des conditions limites par le produit de convolution.

La figure 4.17 analyse le comportement de la sensibilité lors du filtrage d'un champ qui ne comporterait qu'un seul pic dans le coin Nord-Ouest, figure 4.17a, et un ensemble de variables de contrôle η parfaitement homogène. Les bordures Nord et Ouest correspondent à des conditions de symétrie. La colonne de gauche, structures (b), (d) et (f), présente l'application directe de l'équation (4.27) à cette configuration, pour un rayon d'action du produit de convolution croissant. Dès $r = 1, 5$ (taille d'élément), une dissymétrie apparaît dans la structure alors qu'elle n'a pas lieu d'être, puisque ce rayon ne permet pas de considérer des éléments en dehors de ceux immédiatement présents dans la périphérie du point d'application du filtre. La remarque est également valable pour $r = 3$, figure 4.17f, qui présente un pic de sensibilité filtrée au niveau de l'élément original, alors que celui-ci devrait se déplacer vers le coin Nord-Ouest du fait de la symétrie.

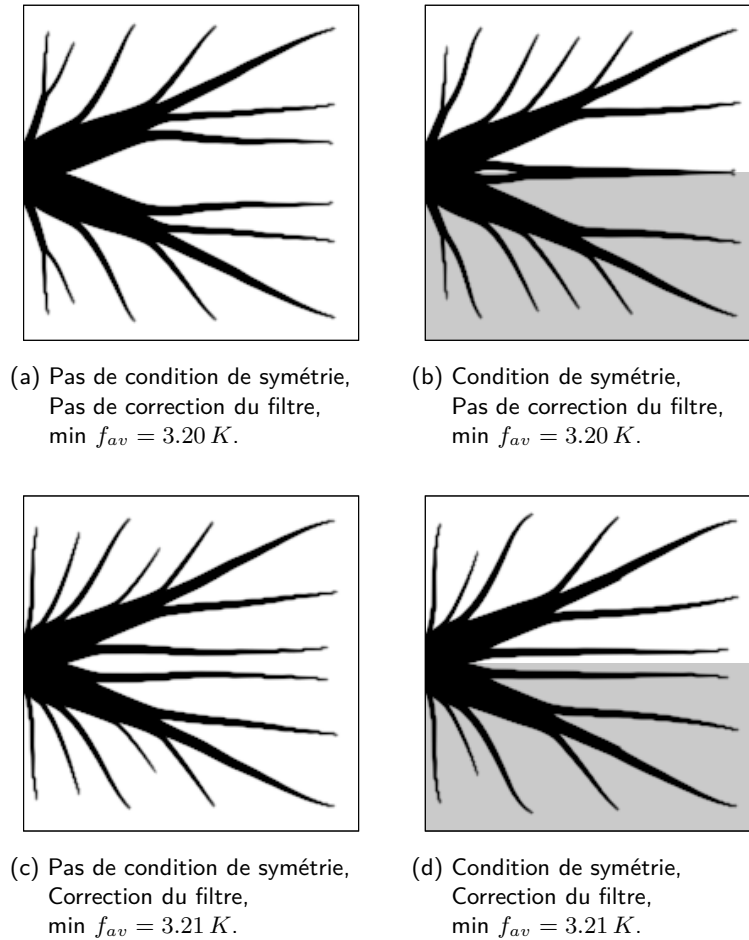
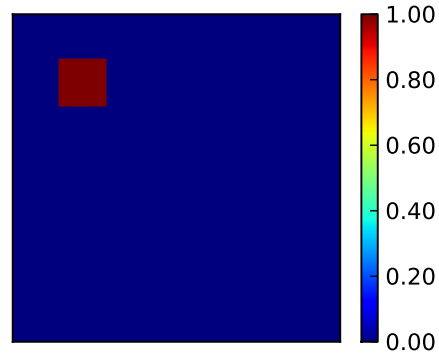


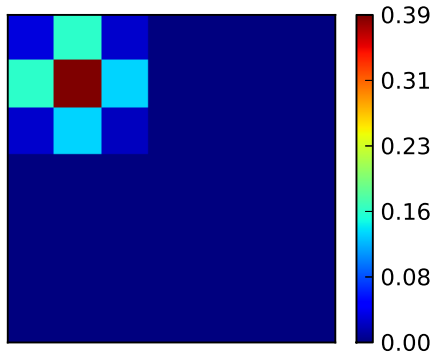
FIGURE 4.16 – Correction de l'effet de bord lors du filtrage de la sensibilité : $\overline{\phi} = 20\%$, filtre arithmétique et filtrage de la sensibilité avec $r = 1, 5$.

L'origine de ce comportement anormal est la non-prise en compte de la symétrie de la sensibilité et des variables de contrôle dans le produit de convolution. Celui-ci, lorsqu'il est appliqué directement au champ de sensibilité, n'intègre pas l'information de symétrie, mais la création d'une extension virtuelle au domaine, d'un nombre d'éléments supérieur au rayon r du filtre, peut corriger ce problème. En symétrisant la sensibilité et les variables de contrôle dans ces nouveaux domaines fictifs, le produit de convolution peut être appliqué au sein du domaine réel comme précédemment, mais en s'appuyant sur une topologie réaliste le long de ses frontières. Les structures (c), (e) et (g) de la figure 4.17 illustrent parfaitement la meilleure prise en compte de la symétrie, les valeurs filtrées de la sensibilité étant symétriques pour $r = 1, 5$ et 2. Pour $r = 3$, la nouvelle sensibilité enjoint bien à une implantation de matière directement dans l'angle Nord-Ouest afin d'éviter la création d'un *checkerboard*.

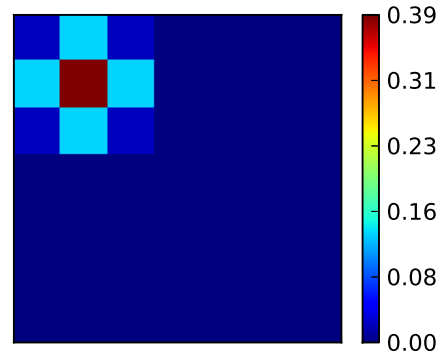
Les figures 4.16c et 4.16d sont établies à l'aide de cette correction, qui permet d'obtenir deux structures identiques qu'elles soient évaluées avec ou sans l'utilisation de leur axe de symétrie. La seule différence notable réside dans les deux courtes dendrites supplémentaires au milieu de la figure 4.16c, en raison d'un critère de pénalisation final p plus faible : la matière les composant serait sans conteste réallouée dans la structure principale si celui-ci était poussé plus avant.



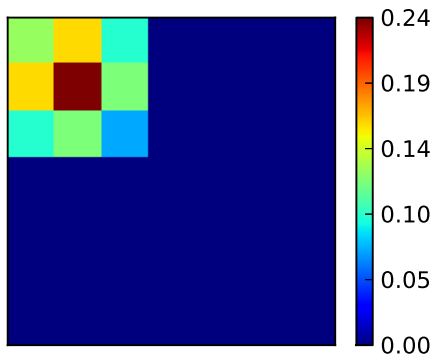
(a) $r = 1.0$



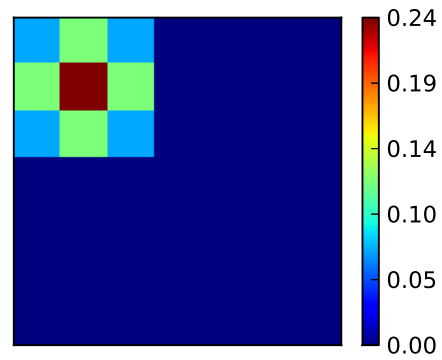
(b) $r = 1.5$



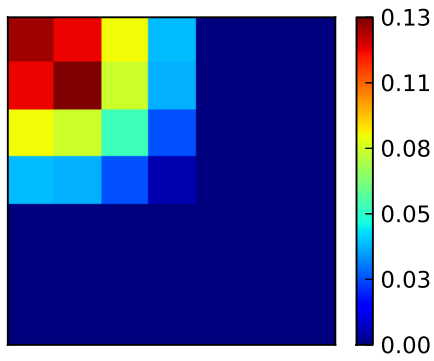
(c) $r = 1.5$



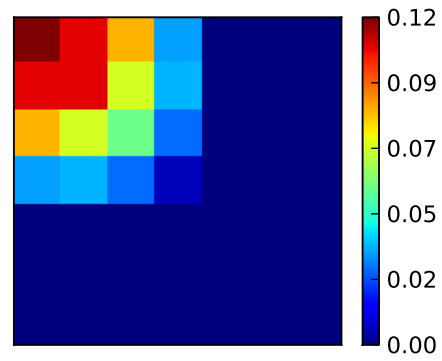
(d) $r = 2.0$



(e) $r = 2.0$



(f) $r = 3.0$



(g) $r = 3.0$

FIGURE 4.17 – Effet de bord du filtre sur la sensibilité avec un champ de variable de contrôle parfaitement homogène : sans correction (à gauche) et avec correction (à droite).

4.7.2 Influence de la porosité $\bar{\phi}$

La porosité de la structure joue un rôle majeur dans le processus de refroidissement, notamment dans le cas de la minimisation de la température moyenne, et cette partie vise à mettre clairement en lumière son rôle dans la performance finale du réseau de matière hautement conductrice. L'objectif est d'obtenir une visualisation similaire à celle présentée dans le cadre des automates cellulaires, en particulier sur les figures 3.9j et 3.20. Pour ce faire, cent instances du même calcul sont évaluées en parallèle, en incrémentant la contrainte sur la porosité maximale $\bar{\phi}$ de l'une à l'autre. En juxtaposant les résultats, il est possible de visualiser l'évolution d'une pseudo-croissance optimale de la structure.

La figure 4.18 présente les résultats les plus pertinents, pour $\bar{\phi}$ variant de 2,5% à 50,0%. Les structures de la première ligne présentent le squelette de base, de forme caractéristique en V, qui croît de façon rationnelle. Les solutions suivantes, de faible porosité ($5\% \leq \bar{\phi} \leq 10\%$), se distinguent par une croissance particulièrement bien structurée : l'ajout de deux ramifications supplémentaires entre (e), (f) et (g) s'effectue à chaque fois en conservant une structure de base identique. En revanche, pour des porosités plus élevées ($\bar{\phi} \geq 15\%$), l'ajout de matière conduit à un comportement un peu plus chaotique : les branchements des ramifications secondaires sur les deux nervures principales varient de façon hiératique, laissant penser que leur position importe bien moins que leur présence. Ce comportement est symptomatique d'un problème possédant un nombre important d'optima locaux dont les minima respectifs sont extrêmement proches, ce qui n'est pas le cas pour de faibles porosités.

La courbe 4.19 présente les valeurs de la fonction objectif f_{av} obtenues à partir des différentes contraintes $\bar{\phi}$, ce qui permet de quantifier l'influence de l'ajout d'une petite quantité de matière hautement conductrice $\Delta\phi$ sur f_{av} . En d'autres termes, il est possible d'établir la sensibilité de la fonction objectif à la porosité maximale et celle-ci s'avère importante pour de faibles valeurs de $\bar{\phi}$. *A contrario*, à partir d'une certaine limite, l'ajout de matériau conducteur n'est plus efficient, comme déjà souligné dans le cadre de l'approche ESO. Il faut également noter que la courbe présentée sur la figure 4.19 peut être correctement approchée avec une fonction de la forme $f_{av}(\bar{\phi}) \sim C_1 + C_2/\ln(\bar{\phi})$, où C_1 et C_2 sont des constantes à déterminer.

En outre, la courbe 4.19 suggère l'existence d'un algorithme permettant de passer rapidement d'une structure à l'autre, en ajoutant directement une quantité $\Delta\phi$ de matériau hautement conducteur à une structure optimale existante, en suivant la même idée que celle développée dans la section 3.2. La détermination d'un tel algorithme rejoindrait le paradigme d'une croissance dynamique contrôlée et discrète, sans qu'il soit pour autant possible d'avoir la certitude que celle-ci soit applicable à d'autres configurations. Il pourrait également constituer un lien entre les automates cellulaires et la méthode SIMP.

4.7.3 Conditions limites thermiques complémentaires

Les investigations réalisées dans ce chapitre ont abordé exclusivement le cas d'un volume fini générant de la chaleur, exemple phare des deux chapitres précédents. Cependant, au regard des bons résultats de l'algorithme et dans le but d'établir un outil pérenne, des conditions limites supplémentaires ont été implémentées. Outre les conditions de température ou d'adiabaticité, les flux de chaleur pariétaux directs ou convectifs peuvent également être intégrés dans la définition de la configuration physique. Cette section vise à présenter deux structures obtenues à partir de dispositions physiques et géométriques différentes, afin d'illustrer la flexibilité de la méthode SIMP.

Volume fini soumis à un flux de chaleur pariétal et refroidi par convection naturelle. Le premier cas étudié est la structure présentée sur la figure 4.20a : un quadrilatère de matériau de faible conductivité $k_0 = 1 \text{ W/(m.K)}$ et de dimensions $\ell \times 2\ell$ (avec $\ell = 5 \text{ cm}$) est soumis sur sa bordure Ouest à un échange convectif caractérisé par $h = 5 \text{ W/(m}^2\text{.K)}$ avec $T_{ref} = 0^\circ\text{C}$ et au

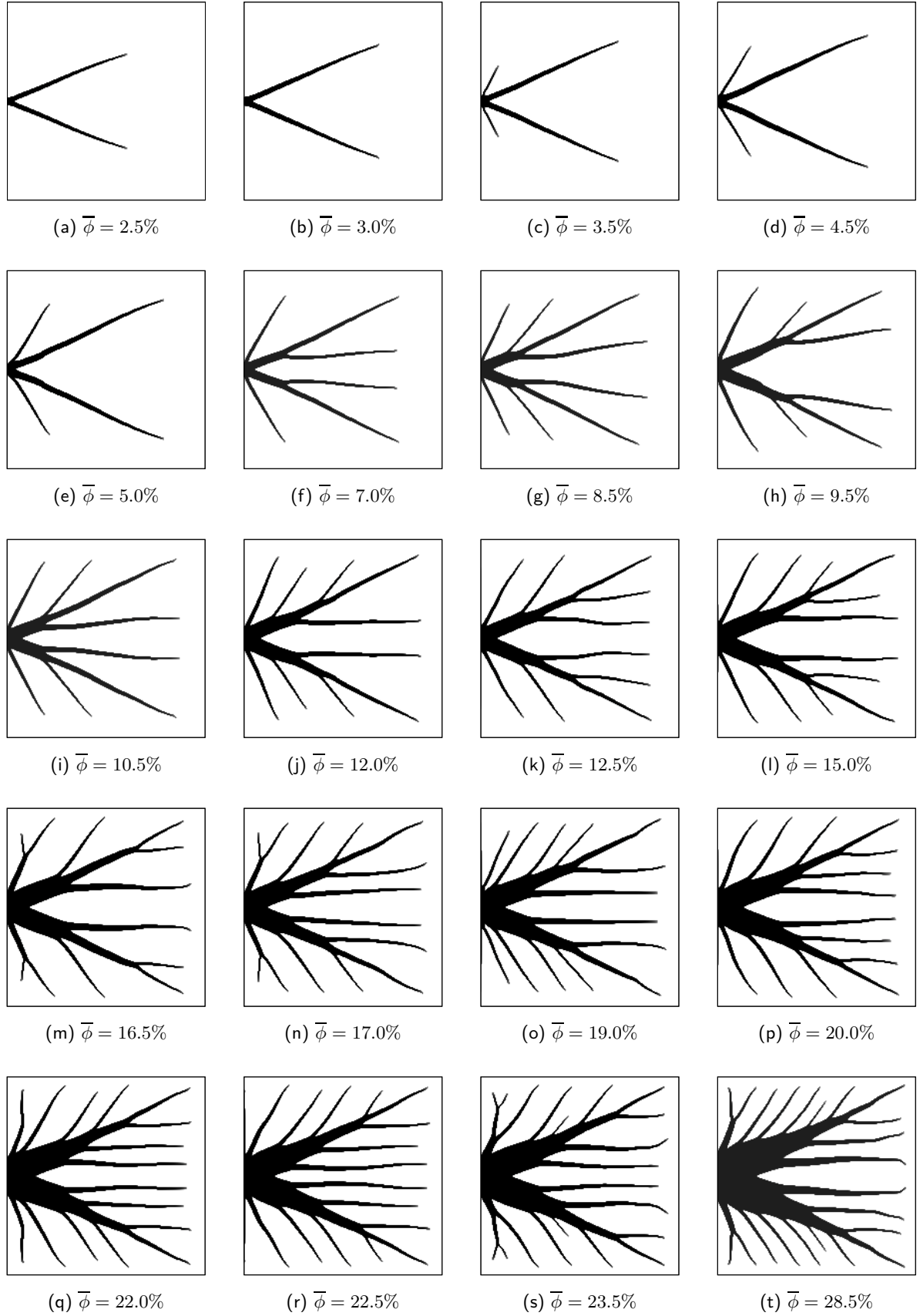


FIGURE 4.18 – Simulation de la croissance structurale en fonction de $\bar{\phi}$ pour $\min f_{av} : \hat{k} = 100$, filtre harmonique, pas de filtrage sur la sensibilité.

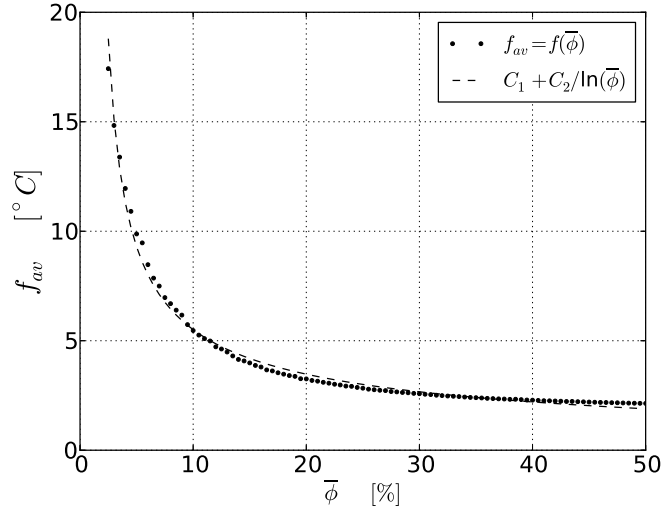


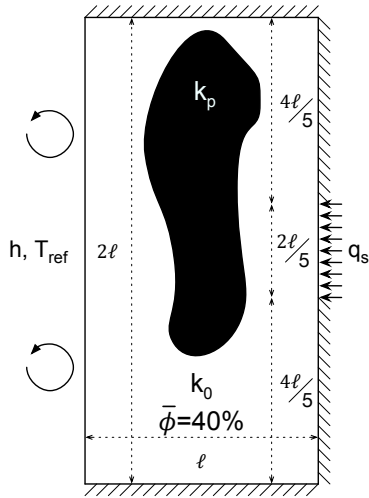
FIGURE 4.19 – Influence de la porosité maximale $\bar{\phi}$ sur la fonction objectif f_{av} .

centre de sa bordure Est à un flux de chaleur $q_s = 1 \text{ kW/m}^2$. Les conditions limites restantes sont adiabatiques et aucune génération de chaleur n'est supposée au sein du domaine de calcul. Cet exemple résulte de la simplification de la problématique relative aux cellules de concentrateurs solaires refroidies par convection naturelle. La fonction objectif vise à minimiser la moyenne de température afin de limiter les contraintes thermiques dans le domaine, en répartissant un matériau conducteur $k_p = 100 \text{ W/(m.K)}$ avec une porosité maximale $\bar{\phi} = 40 \%$.

La figure 4.20b présente la structure de matériau hautement conducteur obtenue, qui lie la zone recevant le flux de chaleur pariétal à la bordure où prend place la convection naturelle. Ainsi, la structure hautement conductrice centrale étale la zone de dissipation convective du flux de chaleur sur une surface trois fois plus importante que celle recevant le flux q_s . Cependant, l'objectif n'étant pas de minimiser la résistance thermique rencontrée par le flux de chaleur mais la moyenne de température, six branchements supplémentaires sont alloués au refroidissement du matériau k_0 , sans lien direct avec la condition limite q_s . De plus, il faut souligner la parfaite symétrie obtenue pour l'architecture du matériau conducteur, en adéquation avec les conditions limites du problème.

Volume fini générant de la chaleur avec deux puits de chaleur et deux flux pariétaux. Le second cas étudié n'a pas l'ambition d'aborder une problématique réaliste, mais d'illustrer la capacité de la méthode SIMP à établir des structures cohérentes. La figure 4.20c détaille la configuration physique du problème sélectionné : un carré de côté $\ell = 10 \text{ cm}$ composé de matériau $k_0 = 1 \text{ W/(m.K)}$ générant de la chaleur ($q_0 = q_p = 10 \text{ kW/m}^3$) est soumis à deux flux pariétaux $q_s = 10 \text{ kW/m}^2$ sur ses arêtes supérieure et inférieure. Les conditions limites restantes sont adiabatiques à l'exception de deux puits de chaleur situés sur l'axe de symétrie horizontale, ayant pour températures respectives $T_{s1} = 0^\circ\text{C}$ (Ouest) et $T_{s2} = 1^\circ\text{C}$ (Est). La fonction objectif est également limitée à la minimisation de la température moyenne, en distribuant de façon optimale un matériau $k_p = 100 \text{ W/(m.K)}$ dont la quantité maximale est $\bar{\phi} = 20\%$.

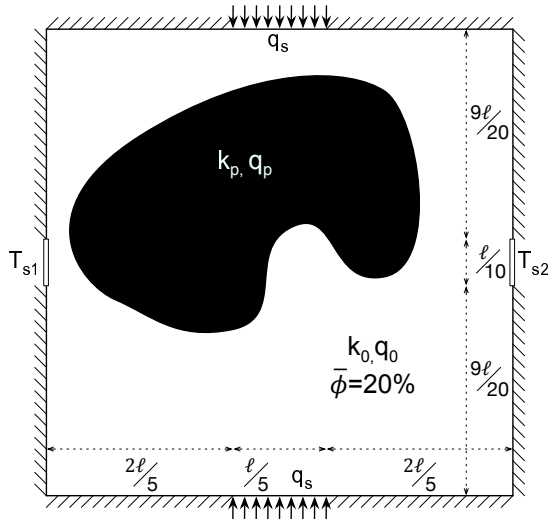
Le résultat du processus d'optimisation est représenté figure 4.20d, avec une solution globale présentant le même caractère multi-échelles que les structures étudiées dans l'article présenté dans ce chapitre. Néanmoins, l'évacuation des flux de chaleur pariétaux additionnels, située à équidistance des deux puits T_{s1} et T_{s2} , s'effectue par une jonction directe entre les surfaces soumises à q_s et le puits de chaleur T_{s1} , celui-ci étant à la température la plus faible. La structure hautement conductrice prenant place à partir du puits T_{s2} , plus petite, ne vise qu'à assurer le drainage du flux de chaleur



(a) Volume fini soumis à un flux de chaleur pariétal et refroidi par convection naturelle : 100×200 variables de contrôle, $h = 5 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$, $T_{\text{ref}} = 0^\circ \text{C}$, $q_s = 1 \text{ kW}/\text{m}^2$, $q_0 = q_p = 0 \text{ W}/\text{m}^3$.



(b) Répartition de matériau hautement conducteur minimisant la moyenne de température : six branches ne sont pas reliées au flux pariétal et refroidissent uniquement le matériau faiblement conducteur.



(c) Volume fini générant de la chaleur, soumis également à deux flux pariétaux, et refroidi par deux puits de chaleur tels que $T_{s1} < T_{s2}$: 100×200 paramètres de contrôle, condition de symétrie centrale, $q_s = 10 \text{ kW}/\text{m}^2$, $q_0 = q_p = 10 \text{ kW}/\text{m}^3$, $T_{s1} = 0^\circ \text{C}$, $T_{s2} = 1^\circ \text{C}$.



(d) Répartition de matériau hautement conducteur minimisant la température : le puits de chaleur le plus froid est relié aux flux pariétaux.

Conditions limites

— température constante T_s

↓↓↓↓ flux de chaleur pariétal q_s

/// adiabatique $\partial T / \partial n = 0$

↻ flux de chaleur convectif h, T_{ref}

FIGURE 4.20 – Exemples de structure obtenue à partir de géométries et conditions limites différentes : $k_0 = 1 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$, $k_p = 100 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$, $\Delta x = \Delta y = 5 \times 10^{-4} \text{ m}$, filtre sur la sensibilité avec $r = 1, 5$.

produit par les taux de génération volumique q_0 et q_p dans sa périphérie. Ainsi, la méthode SIMP permet d'aboutir à une solution physique cohérente, organisant au mieux les ressources du système pour satisfaire la fonction objectif.

4.8 Comparaison entre les différentes approches

Les structures constructales d'ordre 1 développées par Kuddusi et Denton [104], et introduites dans la section 3.1.5, ont servi de référence dans le chapitre 3 pour confronter les résultats obtenus par la méthode des automates cellulaires. Cette section poursuit cette comparaison avec des structures issues de l'approche SIMP et synthétise l'ensemble des solutions et leurs performances, pour les deux géométries constructales caractérisées par $n_1 = 6$ et 8. Les critères, qualifiant l'efficacité des structures en termes de refroidissement, sont les mêmes que ceux introduits dans la section 3.2.4 : la résistance thermique R définie dans l'équation (3.22) et la moyenne de température adimensionnelle A rappelée dans l'équation (3.23).

Les structures évaluées par la méthode SIMP ont été établies à partir des mêmes configurations physiques et géométriques que précédemment : celles-ci sont rappelées dans les tableaux sous les figures 4.21 et 4.22. Les calculs ont été effectués avec l'objectif de minimiser la moyenne de température uniquement, en s'appuyant sur un filtre arithmétique et un filtrage sur la sensibilité ($r = 1, 5$). De plus, le nombre de variables de contrôle mises en œuvre est le même que celui utilisé dans l'approche par attraction locale ou dans la méthode ESO. Cependant, l'obtention d'une structure dont les variables de design sont complètement binaires n'est pas possible, même en augmentant considérablement le paramètre de pénalisation p . Pour pallier ce problème, un filtrage est effectué à la fin du processus d'optimisation, tel que pour chaque paramètre de contrôle $\eta_{i,j}$:

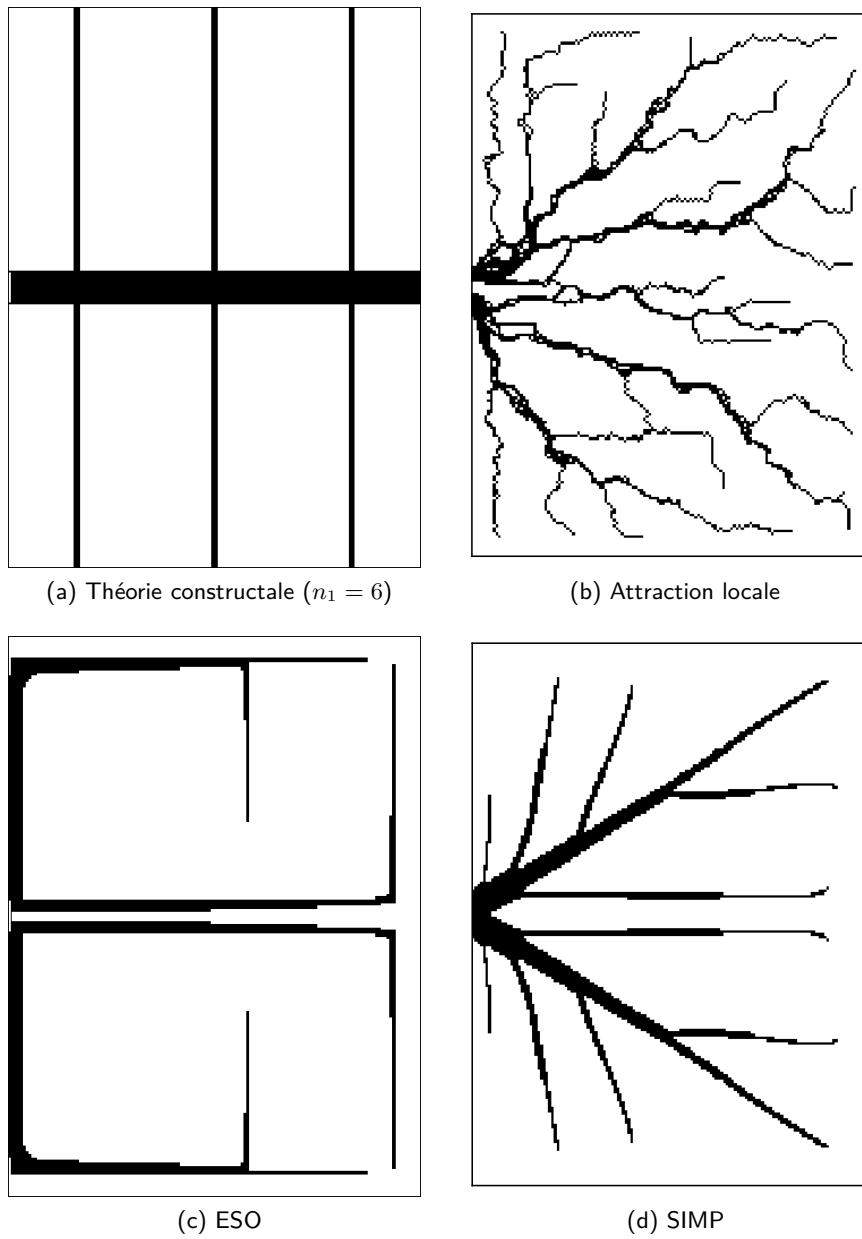
$$\hat{\eta}_{i,j} = \begin{cases} 0 & \text{si } \eta_{i,j} \leq b \\ 1 & \text{si } \eta_{i,j} > b \end{cases} \quad (4.33)$$

où $\hat{\eta}_{i,j}$ est la valeur binaire filtrée de $\eta_{i,j}$. La limite b est établie par dichotomie de sorte que la porosité après filtrage $\hat{\phi}$ reste inférieure à $\bar{\phi}$ (en général $b \approx 0,6$). Les structures obtenues sont présentées sur les figures 4.21d et 4.22d qui rendent compte de leur caractère désormais binaire. Les performances respectives de chacune sont évaluées à partir de FLUENT, en se basant sur un maillage et un schéma numérique identiques à ceux décrits dans les sections 2.5.4 et 3.1.5.

Structurellement, les figures 4.21 et 4.22 permettent de scinder les méthodes d'optimisation étudiées jusqu'à ce stade en deux catégories différentes, en fonction de l'aspect de leur réseau de matière k_p :

- d'une part, la théorie constructale et l'approche ESO, présentées sur les figures (a) et (c), qui envisagent la répartition de matière de façon orthogonale, les échelles inférieures se développant perpendiculairement aux échelles supérieures ;
- d'autre part, les automates cellulaires par attraction locale et la méthode SIMP, présentées sur les figures (b) et (d), qui affichent un réseau de matériau hautement conducteur rayonnant à partir du puits de chaleur.

Du point de vue de la gestion des flux, la seconde catégorie apparaît comme physiquement plus réaliste, ne serait-ce que de par sa ressemblance avec des structures naturelles. Par ailleurs, outre cette catégorisation, il faut noter que la seule méthode qui ne garantit pas une continuité parfaite du matériau hautement conducteur est celle s'appuyant sur l'attraction locale des automates cellulaires, en dépit des efforts mis en œuvre pour y parvenir (voir la sous-section 3.1.4.2). Cette caractéristique affecte particulièrement négativement ses performances thermiques.



| ϕ | H | L | D | Optimisation | $R (\times 10^{-3})$ | $A (\times 10^{-3})$ |
|--------|-----|-------|------|-------------------|----------------------|----------------------|
| - | mm | mm | mm | - | - | - |
| 9,83% | 100 | 73,50 | 5,85 | Constructale | 30,1 | 17,3 |
| | | | | Attraction locale | 44,5 | 20,6 |
| | | | | ESO | 22,9 | 15,9 |
| | | | | SIMP | 21,3 | 9,63 |

(e) Dimensions caractéristiques et comparaison des performances.

FIGURE 4.21 – Comparaison des approches constructales, par automates cellulaires et homogénéisation : 147×200 paramètres de contrôle, $\hat{k} = 400$, $q_p = 0 \text{ kW/m}^3$ et $q_0 = 10 \text{ kW/m}^3$.

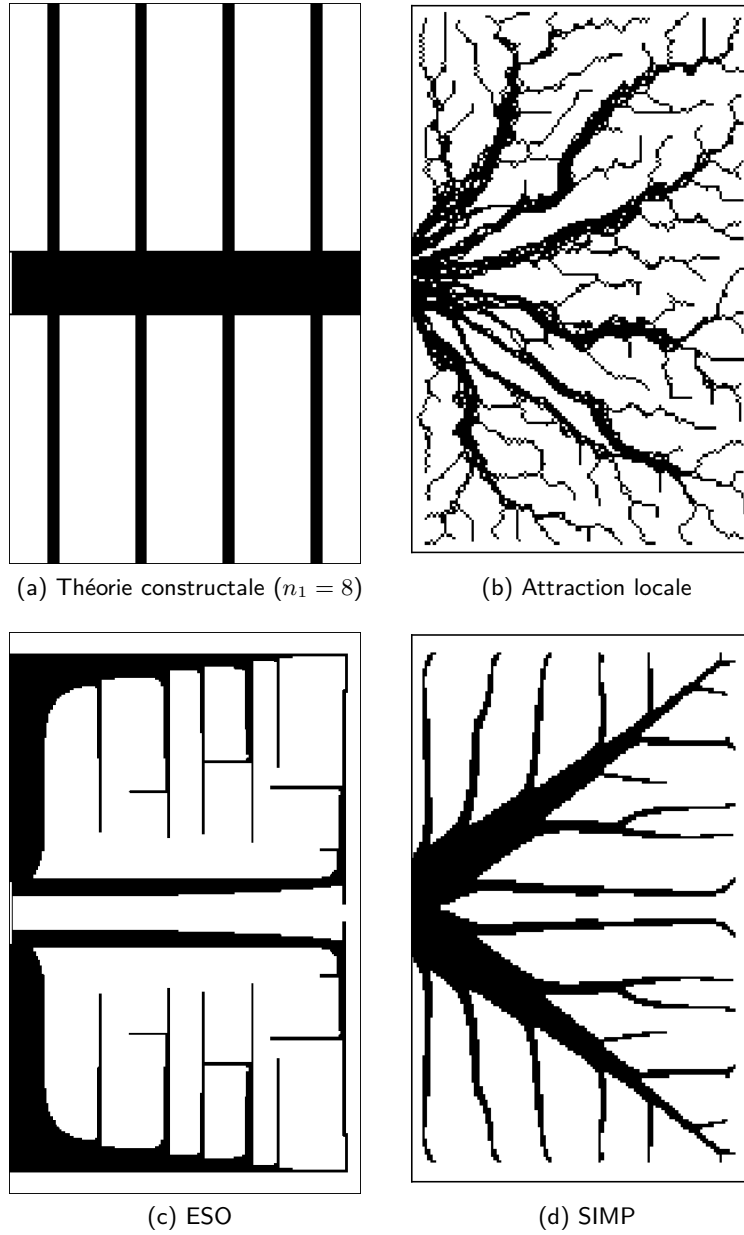


FIGURE 4.22 – Comparaison des approches constructales, par automates cellulaires et homogénéisation : 125×200 paramètres de contrôle, $\hat{k} = 400$, $q_p = 0 \text{ kW/m}^3$ et $q_0 = 10 \text{ kW/m}^3$.

Quantitativement, les tableaux sous les figures 4.21 et 4.22 indiquent qu'en suivant les critères R et A , la méthode SIMP surclasse largement les trois autres approches en terme de refroidissement. Bien que ce résultat soit attendu dans le cadre A , puisque la méthode vise explicitement la minimisation de la moyenne de température, il s'étend sans conteste à R . En d'autre terme, le meilleur refroidissement global de la structure contribue également à minimiser le point de température le plus chaud du domaine. Pour les deux cas confondus, l'approche SIMP permet un gain de performance minimum de 7 % sur R et de 40 % sur A , par rapport aux meilleurs résultats obtenus par les trois autres méthodes.

4.9 Conclusion à propos de l'approche SIMP

Ce chapitre est à mettre en perspective des travaux de Evgrafov *et al.* [80] qui analysent sous un angle théorique la convergence des schémas en Volume Fini dans le cadre de la problématique du contrôle des coefficients de conduction. Leurs travaux soulignent théoriquement l'absence de problème de convergence majeur lors de l'utilisation d'une méthode d'homogénéisation, telle que celle employée dans ce chapitre, en conjonction avec la méthode des volumes finis, ce qui est confirmé empiriquement par les résultats obtenus ici. Par ailleurs, la seconde conclusion importante apportée par ce chapitre est la bonne adéquation de la méthode SIMP au traitement de problématiques multi-objectifs, plusieurs ensembles de Pareto ayant pu être définis.

La comparaison quantitative et qualitative des trois paradigmes d'optimisation que sont l'approche constructale, les automates cellulaires et les méthodes d'homogénéisation donne nettement l'avantage à cette dernière, qui fournit à la fois des solutions efficaces et bien structurées. En revanche, c'est de loin la méthode la plus lourde en termes algorithmique, avec l'ajout au problème direct d'un solveur adjoint et d'une méthode d'optimisation numérique (MMA). De plus, certains points, tels que les conditions limites, nécessitent d'être traités avec précaution à chaque stade du calcul, afin de traduire fidèlement la configuration physique du problème.

Parmi les trois types de paramétrage considérés pour optimiser la topologie de domaines conducteurs différents, il convient de sélectionner une approche pour aborder l'optimisation des transferts de masse et de chaleur. Deux constats ont guidé ce choix :

- Par nature, l'optimisation des configurations conducto-convectives est une problématique bi-objectif. Quel que soit le problème considéré, l'enjeu est de minimiser la puissance mise en œuvre pour mettre en mouvement le fluide, tout en maximisant ou en minimisant une fonction objectif portant sur la thermique du problème.
- En deux dimensions, les structures favorisant le transport du flux de chaleur par le fluide sont souvent composées de sous-ensembles déconnectés, de façon similaire aux structures obtenues par le biais de la méthode SIMP et minimisant la variance de la température.

A l'aune de ces deux remarques, une méthode par homogénéisation des coefficients semble particulièrement bien adaptée pour aborder ce problème, en addition de ses excellentes performances. Le chapitre suivant examine l'optimisation topologique d'écoulements laminaires couplés à des transferts de chaleur avec cette approche.

Deuxième partie

Optimisation topologique des échanges de chaleur conducto-convectifs

Chapitre 5

Optimisation topologique des transferts de masse et de chaleur en régime laminaire

Ce chapitre étend la méthode SIMP (*Solid Isotropic Material with Penalization*) développée au chapitre 4 à l'optimisation des échanges de chaleur conducto-convectifs, en conservant la structure de l'approche qui s'appuie sur un solveur direct, un solveur adjoint et la méthode des asymptotes mobiles. Cependant, le problème change de nature, puisqu'il vise désormais à déterminer la meilleure disposition de domaines fluide et solide, et il est rarement référencé sous la dénomination SIMP dans la littérature, cet acronyme devenant trop restrictif pour traduire la problématique de transport des flux. Les configurations étudiées au fil de ce chapitre sont limitées au régime laminaire, afin de se soustraire aux problèmes de fermeture des équations de Navier-Stokes engendrés par la turbulence. Les travaux présentés dans ce chapitre ont été publiés dans *Numerical Heat Transfer : Part B, Fundamentals* sous le titre « *Topology optimization of heat and mass transfer problems : laminar flow* », puisqu'ils s'inscrivent à la suite de l'article [118].

5.1 Abstract

The design of efficient structures for heat and mass transfer problems involves the implementation of an appropriate topology optimization strategy in order to fully take into account the bi-objective nature of the problem. This article couples the Finite Volume Method (FVM), for the direct solver, with the discrete adjoint approach, for the sensitivity analysis, in order to tackle both fluid dynamic and heat transfer optimization in the frame of laminar flows. Details are provided about the sparsity pattern of the discrete adjoint system, which requires a special attention to select a suitable matrix iterative solver. Several examples underline the adequacy of topology optimization in conjunction with FVM for the minimization of the power dissipated by the fluid. Then, a bi-objective problem aiming at minimizing the pressure drop while maximizing the recoverable thermal power is solved by the identification of its Pareto frontier, thanks to an Aggregate Objective Function (AOF) method. The main conclusion deals with the possibility of finding an acceptable trade-off between both objectives and the potential of topology optimization for heat and mass transfer optimization.

5.2 Introduction

Multidisciplinary design optimization is a wide-ranging topic through the dedicated scientific literature, especially for addressing industrial and realistic problems. Two main classifications can be adopted to categorize such problems, regardless the physical field involved, depending on the nature of optimization strategies or the way to set the design parameters governing the geometry. On the

Nomenclature

| | | | |
|---------------|----------------------------|------------------------|--|
| \mathbf{A} | Pentadiagonal band matrix | Γ | Fluid flow boundary condition ($\partial\Omega_f$) |
| A_p | FVM central coefficient | $\boldsymbol{\lambda}$ | Adjoint vector |
| $A_{w,e,s,n}$ | FVM side coefficient | Λ | Generic scalar ϕ or σ |
| \mathbf{B} | Source term vector | μ | Dynamic viscosity |
| C_p | Heat capacity | Φ | Shear force |
| D | FVM diffusive coefficient | ϕ | Generic scalar for U , V , P or T |
| \mathbb{E} | Design parameter set | φ | Global porosity |
| F | FVM convective coefficient | ψ | Generic scalar ϕ or η |
| f | Objective function | σ | Generic scalar for α , k or q |
| k | Thermal conductivity | ρ | Density |
| \mathcal{L} | Lagrange function | Θ | Residual initialization value |
| L, ℓ | Length | θ | Weighting factor for shear force |
| m, n | Limits of spatial index | Ω | Spatial set |
| N | Number of elements | | |
| \mathbf{n} | Normal vector | | |
| P | Pressure | | |
| p | Convexity parameter | | |
| q | Heat generation rate | | |
| \mathbf{R} | Residual vector | | |
| Re | Reynolds number | | |
| S_p, S_u | FVM source term | | |
| s | Index loop | | |
| T | Temperature | | |
| u, v | Velocity components | | |
| w | AOF weighting | | |
| \mathbf{X} | Direct variable vector | | |
| x, y, z | Coordinate | | |

Subscripts

| | |
|--------|---------------------------|
| c | Critic |
| d | Fluid dissipated power |
| e | Energy |
| f | Fluid |
| i | Vector index |
| i, j | Spatial index |
| i, o | In(ner), out(er) |
| h, v | Horizontal, vertical |
| p | Central coefficient |
| r | Recoverable thermal power |
| s | Solid |
| w | Wall |

Greek letters

| | |
|--------------------------------|-----------------------------|
| α | Pseudo inverse permeability |
| $\beta, \delta, \gamma, \zeta$ | Generic coefficients |
| $\Delta x, \Delta y$ | Mesh size |
| ϵ | Convergence criterion |
| η | Design parameter |

Symbols

| | |
|-------------------------------|---------------------------|
| $\overline{\cdot}$ | Maximal |
| $\underline{\cdot}$ | Minimal |
| $\widetilde{\cdot}$ | FVM numerical filter |
| $\widehat{\cdot}$ | Objective function filter |
| $\partial \cdot / \partial n$ | Normal derivative |

N.B.: vectors and matrices are in bold letters

one hand, the first categorization lies on the internal method guiding the optimization process, such as classified by Rao in [3]. Summarily, the optimization methods aims at finding a global extremum belonging to an *objective function*, also named *cost function*, over a set of variables. The adopted strategy may use some values of this function in order to operate the optimization process and may also lean on an auxiliary sub-strategy by examining its derivative with respect to its variables. This particular class of methods is called *gradient-based*, by contrast with the complementary approach which is said *gradient-free*, and has the advantage of drastically speeding-up the convergence process.

On the other hand, the second classification addresses the optimization problem by means of their goals, which can be divided into three main categories in the frame of structural design: size, shape, and topology optimization [2]. Each concept differentiates itself by using a specific parametrization, such as:

- size optimization: the structure is known *a priori* and the algorithm only aims at modifying a few characteristic parameters, such as width or length, in order to minimize (or maximize) a physical quantity;
- shape optimization: the design parameters are mainly the boundaries of the structure and the optimization process literally modifies its shape to satisfy the objective function;
- topology optimization: the optimization criteria are satisfied by directly looking for the best layout of material, independently of a pre-established shape or configuration. In other words, this optimizes the assignation of material without any mindset regarding the final configuration.

The advantage of topology optimization over the first two classes is to reach radically new designs minimizing (or maximizing) an explicit objective function. However, its implementation is complex since it requires an algorithm capable of efficiently allocating (or reallocating) the material constituting the structures. A well-known method working around this issue consists of building a size optimization problem from the initial topology optimization one [2]: the meshes used to discretize and solve the partial differential equations (PDE) governing the physical problem also store the design parameters of the optimization problem. These locally controls one or more physical quantities delineating if the local elements inherit from physical properties of the optimized material, the domain surrounding it or a combination of both of them.

From an algorithmic point of view, topology optimization lies on three main steps that are respectively the direct or primal solver, the sensitivity analysis, and the numerical optimization. Each stage requires to select a suitable strategy according to the nature of the problem. For example, the direct solver aiming at establishing the solution of a PDE set can perform its calculation process using, among different approaches, the Finite Element or Finite Volume Methods (FEM or FVM) over various numerical grids [96]. Similarly, the sensitivity analysis can be achieved thanks to automatic differentiation, continuous or discrete adjoint methods, depending on the PDE and the direct solver nature [6]. The same remarks apply to the numerical optimization algorithm that can be selected from a wide range of methods for non-linear problems [3].

Topology optimization has been initially established for structural mechanical optimization problems [2]. In 2003, Borrvall and Petersson [56] introduced for the first time the theoretical background to perform it with fluids in Stokes flows and have been followed by the articles summarized in Tab. 5.1 since. The leading problem addressed by these studies aims at the minimization of the total power dissipation occurring during fluid transfer, namely minimizing the pressure drop between inlet and outlet flows, by reaching an optimal configuration of solid and fluid regions. Three different kinds of steady flow have been investigated so far:

| Article | Year | Flow | CFD solver | Adjoint | Opt. alg. |
|---------|------|---------------|------------|------------|-----------|
| [56] | 2003 | Stokes | FEM | discrete | MMA |
| [58] | 2005 | Navier-Stokes | FEM | discrete | MMA |
| [60] | 2006 | Darcy-Stokes | FEM | n/a. | MMA |
| [63] | 2006 | Navier-Stokes | FEM | discrete | MMA |
| [64] | 2007 | Darcy-Stokes | FEM | discrete | MMA |
| [68] | 2008 | Navier-Stokes | FVM | continuous | n/a. |
| [72] | 2009 | Stokes | FEM | continuous | MMA |
| [77] | 2011 | Navier-Stokes | FEM | discrete | GCMMA |

Table 5.1: Summary of primal CFD solvers, adjoint method for sensitivity analysis and numerical optimization algorithms used for topology optimization of fluid flows.

- Stokes flows [56, 72]: the inertia effects are insignificant in comparison to the viscous forces ($Re \ll 1$). Stokes equations are linear for incompressible Newtonian fluid and consequently allows an advanced mathematical analysis, such as the existence of solutions regarding the optimization problem.
- Darcy-Stokes flows [60, 64]: solid domain is seen as being porous and fluid within it is driven by the Darcy equation. Therefore, the optimization process aims both to reach an ideal fluid path and to build an optimal layout for the porous media as well, opening the way for optimal design of filters for instance. Moreover, the Darcy-Stokes equation leads to an appropriate no-slip boundary condition along the fluid/solid interfaces, as carefully examined by Guest and Prévost in [60].
- Navier-Stokes flows: the studies mainly point up the use of high-level programming frameworks for topology optimization, especially [58, 63, 68], with the exception of Kreissl *et al.* [77] who consider structural optimization of unsteady flows. Olesen *et al.* [63] investigate the influence of Reynolds number on the optimal geometries and show significant structural differences according to the flow regime.

Furthermore, it is worth noting that authors have a preference for FEM in association with a discrete adjoint formulation to compute the velocity-pressure solution fields and the sensitivity analysis, as shown in Tab. 5.1. Only Othmer proposes in [68] a continuous adjoint formulation for the computation of topological sensitivities, embedded in the FV solver OpenFOAM. On the one hand, continuous adjoint analytically derives the adjoint equations from the primal equations and then discretizes them to form the adjoint solver. On the other hand, discrete adjoint adopts the opposite approach, deriving the adjoint equations from the discrete form of the primal equations. Preeminence of one method over the other one is still an open-question, both approaches showing similar results in many different cases (see [80]).

Conductive problems have also been addressed by means of topology optimization, mainly to establish the optimal distribution of two materials with different thermal conductivities. Two algorithms have been investigated: Evolutionary Structural Optimization (ESO), based on a discrete design variable (or *hard-kill*) method [114], and Solid Isotropic Material with Penalization (SIMP), lying on a continuous design variable (or *soft-kill*) approach [2]. Physically, *hard-kill* parametrization swaps material in one step from one conductivity field to the other one, whereas *soft-kill* approach increases or decreases it by a small quantity. Li *et al.* successfully studied several configurations demonstrating the potential of ESO method in [46, 50]. Similarly, Gersborg-Hansen *et al.* investigated in [59] the *Volume-to-Point* (VP) problem introduced by Bejan in [83] with SIMP approach. Their main

conclusions underline that FEM and FVM, in conjunction with a discrete adjoint method, do not lead to significant differences of optimal conductive structures, even though they handle differently the boundary conditions. For the same configuration, Zhang and Liu showed in [70] that topology optimization provides better performances than *bionic* optimization, using only FEM coupled with a discrete adjoint. In 2011, Evgrafov *et al.* theoretically analyzed the convergence of FVM problems involving the control of their conduction coefficients in [80], as well as the few structural differences induced by discrete vs. continuous adjoint. Recently, Marck *et al.* [118] also studied the VP problem with SIMP method, but in the frame of multi-objective optimization, aiming at minimizing both average and variance temperature of conductive fields. Using FVM method with discrete adjoints, their results underline the possibility to reach a set of Pareto optimal solutions for multi-objective topology optimization.

Studying separately flow configuration and conductive heat transfer problems naturally leads to the next optimization challenge: unifying both approaches to tackle at the same time heat and mass transfer optimization. In 2007, Bruns proposed a topology optimization method for non-linear steady-state heat transfer with conduction and convection, but without explicitly evaluating the fluid motion [67]. On the contrary, Dede studied in [126] the topological optimization of a bi-dimensional geometry involving both Navier-Stokes and energy equations, explicitly solved with COMSOL commercial software (FEM). This first results have been followed by Kontoleonos and Papoutsis-Kiachagias' works (*et al.*), who extended the model to turbulent flows thanks to the Spalart-Allmaras model [79,81]. However, a significant difference exists between both studies: in [79, 81], the authors do not consider the temperature field within the solid domain, numerically setting it to a constant value, whereas [126] optimizes both fluid and solid domains by adjusting their respective thermal conductivities. In the first case, thermal objective functions can only be applied to the fluid domain, for instance to maximize the transport of convective heat flux, while the second case allows taking into account temperature through both fluid and solid areas.

This article addresses topology optimization of heat and mass transfer based on FV and discrete adjoint methods. After introducing the problem and the main algorithmic scheme, a special attention is given to the regularization of velocity profiles along the fluid/solid interfaces, which has never been studied for FVM, to the authors' knowledge. Then, following the same line as [126], solid domain is assumed to drive the heat flux at a given thermal conductivity, allowing the optimization of both conduction and convection phenomenon impacting the thermal objective function. Section 5.3.3 studies the sensitivity analysis step, providing details about the derivation of FVM numerical schemes and analyzing the matrix sparsity pattern of the dual solver. Moreover, additional explanations are provided to deal properly with the multi-objective nature of the heat and mass transfer problem, in a similar manner to [118]. The results displayed in the last section intend to demonstrate the suitability of FVM in the frame of topology optimization of Navier-Stokes flows by comparing them to three academic cases introduced in [56]. The last example investigates a full bi-objective optimization leading to the Pareto set of solutions, which is the first attempt of this kind undertaken in topology optimization of heat and mass transfer, to the authors' knowledge.

5.3 Topology optimization for heat and mass transfer

This section introduces the main characteristics of topology optimization applied to a Navier-Stokes flows including heat flux transport. Special attention is paid to the solid/fluid interface regularization required by the FVM and to the sensitivity analysis step involving a discrete adjoint evaluation.

5.3.1 Topology optimization analysis

5.3.1.1 Problem formulation

Consider a domain Ω made of fluid and solid subdomains, respectively denoted Ω_f and Ω_s , such as $\Omega = \Omega_f \cup \Omega_s$. The Ω frontiers, called $\partial\Omega$, are subject to 3 different boundary conditions: inlet flows with parabolic profile \mathbf{u}_i at constant temperature T_i , outlet flows with parabolic profile \mathbf{u}_o with zero temperature gradient ($\partial T/\partial n = 0$), and walls with a no-slip assumption ($\mathbf{u}_w = 0$) at constant temperature T_w , or subject to normal heat flux q_w or adiabatic such as $\partial T/\partial n = 0$. Fluid is assumed to be Newtonian and incompressible, under steady state laminar regime. Its physical properties are dynamic viscosity μ , thermal heat capacity C_p , density ρ and thermal conductivity k_f . Solid subdomains are characterized with a thermal conductivity k_s (generally $k_s > k_f$) and the whole domain can be subject to a constant heat generation rate q_f or q_s , depending on its location. Figure 5.1 shows a configuration based on these parameters, with an arbitrary layout of solid (black part) and fluid (white part) subdomains, as well as a random distribution of its boundary conditions.

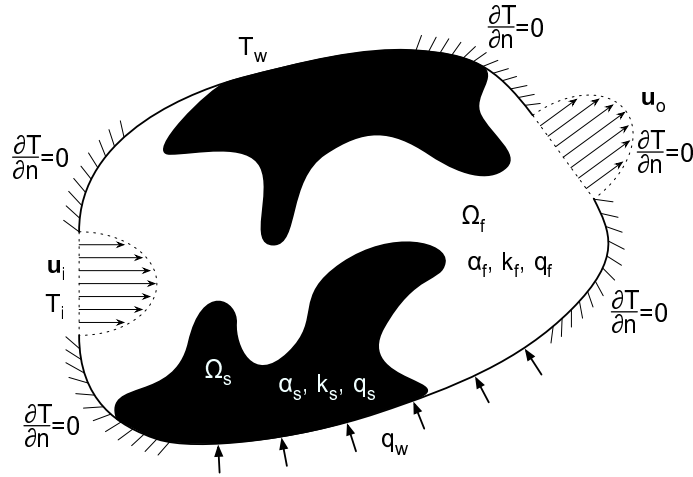


Figure 5.1: Illustration of Ω domain and its boundary conditions: input (\mathbf{u}_i, T_i) and output $(\mathbf{u}_o, \partial T/\partial n = 0)$ flows - constant temperature (T_w), constant heat flux (q_w), and adiabatic ($\partial T/\partial n = 0$) walls.

Applying topology optimization to this problem aims at minimizing or maximizing an objective function f by optimizing the distribution of Ω_f and Ω_s subdomains. The method proposed by Borrvall and Petersson [56] is to add an inverse permeability coefficient α to Navier-Stokes equations, ranging from 0 to a sufficiently large value, in order to create a suitable momentum sink emulating the behavior of solid subdomains. As underlined by Abdelwahed *et al.* [72], this can also be seen as adding an internal friction force between the fluid and a small obstacle, which is proportional to the local fluid velocity, in a similar manner to the Darcy's law within a porous media. This strategy allows the resolution of only one set of equations for both subdomains by adequately setting α , k , and q coefficients of Navier-Stokes and energy equations. Under the assumptions made in this section, these equations are the following:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (5.1)$$

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \alpha(\eta) \mathbf{u} = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (5.2)$$

$$\rho C_p (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = \nabla \cdot (k(\eta) \nabla T) + q(\eta) \quad (5.3)$$

where \mathbf{u} , P , and T stand respectively for flow velocity, pressure, and temperature. A local design parameter η , also called control variable, discrete at this point, is introduced to reflect the domain topology, such as for $\mathbf{x} \in \Omega$:

$$\eta(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \text{if } \mathbf{x} \in \Omega_s \\ 1 & \text{if } \mathbf{x} \in \Omega_f \end{cases} \quad (5.4)$$

Accordingly, for $\eta \in \llbracket 0, 1 \rrbracket$, the coefficients of Eqs. (5.1)-(5.3) characterizing the fluid flow and heat flux behaviors are:

$$(\alpha(\eta), k(\eta), q(\eta)) = \begin{cases} (\alpha_s, k_s, q_s) & \text{if } \eta = 0 \\ (\alpha_f, k_f, q_f) & \text{if } \eta = 1 \end{cases} \quad (5.5)$$

with the extrema of the inverse porosity α being theoretically $(\alpha_f, \alpha_s) \rightarrow (0, +\infty)$. However, such values could not have been achieved due to the numerical implementation, but sufficiently small and large limits provide satisfactory results, as for example $(\alpha_f, \alpha_s) = (10^{-1}, 10^5)$.

The objective function f , which explicitly depends on \mathbf{u} , P , and T fields, is also implicitly based on the design parameters η , through α , k , and q scalar fields. Therefore, the optimization problem can be stated under its continuous form as:

$$\begin{aligned} \min_{\eta} \quad & f(\mathbf{u}, P, T) \\ \text{subject to} \quad & \text{Eqs. (5.1) - (5.5)} \\ & \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \eta d\Omega \leq \overline{\varphi} \\ & \mathbf{x} \in \Omega, \eta \in \mathbb{E} \end{aligned} \quad (5.6)$$

where \mathbb{E} pictures the set of possible distributions of Ω_s and Ω_f subdomains. The second constraint of Eq. (5.6) limits this set by requiring that the fluid fraction over the whole domain is lower than a maximal global porosity, denoted $\overline{\varphi}$. This condition allows not filling the whole structure with fluid flow, which is the trivial best solution for most pressure drop reduction problems.

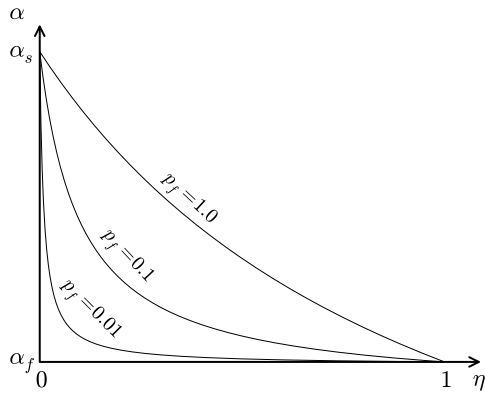
5.3.1.2 Algorithmic scheme

The main difficulty emerging from the formulation introduced in 5.3.1.1 is to deal with the discrete nature of subdomain distribution. Without further assumptions, the algorithm performing the optimization process should modify Ω_s or Ω_f subsets in order to minimize f with a combinatorial strategy, involving an expensive computational cost if no further details are available to guide the process. A convenient information could be the topological gradient reflecting the impact on $f(\mathbf{u}, P, T)$ of allocating (or deallocating) small parts of solid material and consequently allowing to select the best elements to swap from one subdomain to the other one. This evaluation must be performed over the whole Ω domain with the smallest element size as possible, making it particularly time-consuming, especially due to the PDE set involved.

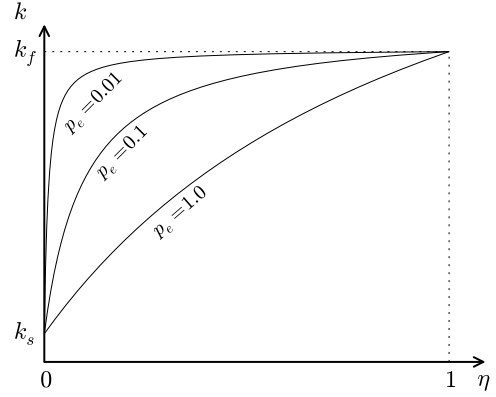
The homogenization method, also known as SIMP method [2], avoids the difficulties induced by the discrete character of the local design parameter by using a continuous one. Consequently, α , k , and q scalars also vary continuously as a function of η , taking intermediate states between their extreme values defined in Eq. (5.5), following the convex function:

$$\sigma(\eta, p) = \sigma_s + (\sigma_f - \sigma_s) \eta \frac{1+p}{\eta+p} \quad \text{with} \quad 0 \leq \eta \leq 1 \quad \text{and} \quad p > 0 \quad (5.7)$$

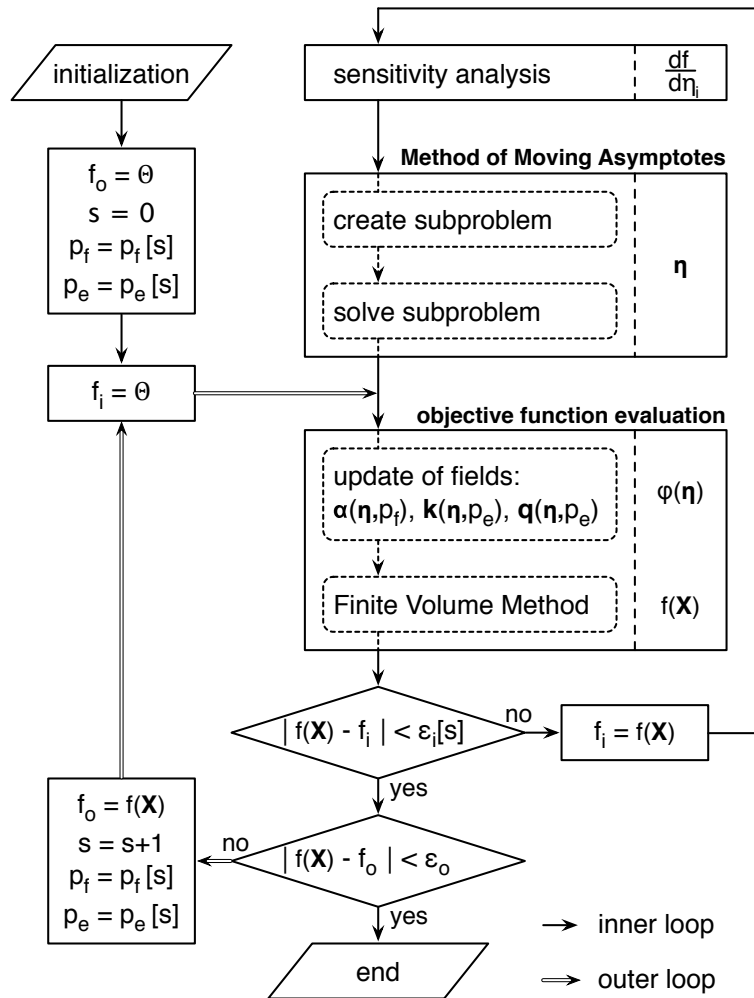
where σ is a generic scalar standing for α , k or q . Furthermore, a parameter p is added to adjust the convexity of this function, as pictured on Figs. 5.2a and 5.2b, and plays a central role in the



(a) Flow penalization function $\alpha(\eta, p_f)$:
 $\alpha(0) = \alpha_s \rightarrow \infty$ (10^5) and $\alpha(1) = \alpha_f \rightarrow 0$ (10^{-1}).



(b) Energy penalization function $k(\eta, p_e)$ for $k_f > k_s$:
 $k(0) = k_s$ and $k(1) = k_f$.



(c) Main loops of algorithmic strategy: outer loop (double line arrow) and inner loop (single line arrow).

Figure 5.2: Integration of both penalization processes into SIMP strategy.

convergence process. Since design parameters are continuous, Ω domain includes solid and fluid elements, but also composite materials acting like a porous media. The more convex is the σ function ($p \approx 0.01$), the more the optimization algorithm tolerates the existence of intermediate states. Conversely, the more linear is the σ function ($p \approx 1.0$), the more the structure suppresses the *levels of gray* to converge towards a *black & white* design. This behavior is particularly convenient to slow down the convergence process in order to avoid the local optima. Lastly, one parameter p is defined for each equation involving one or more σ scalars, respectively denoted p_f for Eq. (5.2) and p_e for Eq. (5.3), in order to control separately the convergence relative to the fluid flow and the heat flux transport.

The strategy developed through this article mainly relies on the SIMP method proposed in the dedicated scientific literature [2, 118], with minor adjustments due to the fluid flow. Figure 5.2c shows the different steps required to perform the optimization method, which are divided into two main loops:

- **The inner loop** is displayed on the top and right corner (\rightarrow , Fig. 5.2c) and summarizes the 3 classic steps of SIMP. Each step is pictured by a solid frame, grouping several sub-steps pictured by dashed frames, and points out which parameters are evaluated (on the right-hand side):
 1. The evaluation of the objective function by means of FVM;
 2. The sensitivity analysis by means of a discrete adjoint method;
 3. The optimization algorithm (Method of Moving Asymptotes).

It is worth noting that the classical sensitivity filtering step aiming at avoiding the checkerboard problems has not been proven to be useful for the cases considered.

- **The outer loop** is underlined with double lines fully merging the inner loop (\Rightarrow , Fig. 5.2c) and its advancement is indexed by means of an integer s ranging from 0 to a fixed number of iterations. At the difference of classical SIMP approaches, which gradually increase their convexity parameter, each p_f and p_e values of each outer iteration are stored at the beginning of the optimization process, allowing to adapt their increasing steps depending on the difficulties of inner loops to converge. If the path defined by these parameters is carefully chosen, the convergence process could be drastically speeded up. It is worth noting that the inner residual ϵ_i is also reduced at each outer loop ($\epsilon_i[s]$), forcing the inner convergence to be more and more accurate.

Exiting a loop is based on a convergence test, represented by a black diamond. The residual of each loop is evaluated as the absolute value of the difference between the current objective function f and its value at the previous iteration, respectively f_i for the inner loop or f_o for the outer loop. Some multi-objective calculations dealing with values of f close to 0 discard residuals calculated from a relative difference or involving f to its denominator. Each residual is initialized with a large value Θ roughly equal to ten times the order of magnitude of the initial objective function.

5.3.2 Finite Volume Method

This subsection summarizes the basics of FVM for fluid dynamic problems, as introduced by Versteeg and Malalasekera in [96]. In addition, the present approach introduces a method to take into account the momentum sink of Eq. (5.2) and properly regularizes the velocity profile along of the solid subdomains.

5.3.2.1 Modified FVM formulation

The transport Eqs. (5.2) and (5.3) are discretized over a cartesian grid involving control volumes of unchanging size $\Delta x \times \Delta y$, with a staggered configuration for velocity components in order to avoid the checkerboard problems relative to the pressure field. This mesh is displayed on Fig. 5.3a: the field of η variables, controlling the physical design parameters α , k , and q (left side), is plotted beside the fields of direct variables u , P , and T (right side). u and v grids are shifted of half of the mesh size following respectively x - and y -axis, creating the staggered scheme. The position of each element is located on its grid thanks to two indexes, $0 \leq i \leq m$ for x -axis and $0 \leq j \leq n$ for y -axis, m and n being respectively the maximum number of elements. Fig. 5.3a shows how the indexes of u and v velocities are shifted for a cluster of 3 gray control volumes. It underlines that both design parameters and scalars share the same positions over the grid: only u components have different locations. Consequently, if $N_\eta = m \times n$ design elements are required to hold the set Ω , it involves the same number of discrete elements for all the scalars such as N_p or N_T , with the exception of $N_u = (m - 1) \times n$ for u -velocity and $N_v = m \times (n - 1)$ for v -velocity.

The transport equations for momentum and energy can be derived from a modified generic equation, having the following form:

$$\beta(\mathbf{u} \cdot \nabla)\phi + \gamma\phi = \nabla \cdot (\delta \nabla \phi) + \zeta \quad (5.8)$$

Replacing the variable ϕ by u or v , and by assuming that $\beta_{u/v} = \rho$, $\gamma_{u/v} = \alpha(\eta)$, $\delta_{u/v} = \mu$ and $\zeta_u = -\partial P / \partial x$ or $\zeta_v = -\partial P / \partial y$, leads to both projections of vector Eq. (5.2) along x - and y -axis. In a similar manner, if $\phi = T$, and assuming that $\beta_T = \rho C_p$, $\gamma_T = 0$, $\delta_T = k(\eta)$ and $\zeta_T = q(\eta)$, then Eq. (5.8) becomes the energy Eq. (5.3). Therefore, studying the discretization process is reduced to Eq. (5.8) and is easily extended to Navier-Stokes and energy equations by selecting the appropriate values of coefficients β , γ , δ , and ζ .

Due to the staggered grids, some scalars have an inappropriate location to take part in the discretization. The challenge is to conveniently move them from the center of their control volume to their interfaces, which coincide with the location where the discretization process takes place. Consider a generic scalar field Λ involved in a configuration of several staggered cartesian grids, similar to the one displayed in Fig. 5.3a. A numerical filter can be applied to displace its discrete values, two formulations being available in the scientific literature [59]:

- Arithmetic mean:

$$\tilde{\Lambda} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Lambda_i \quad (5.9)$$

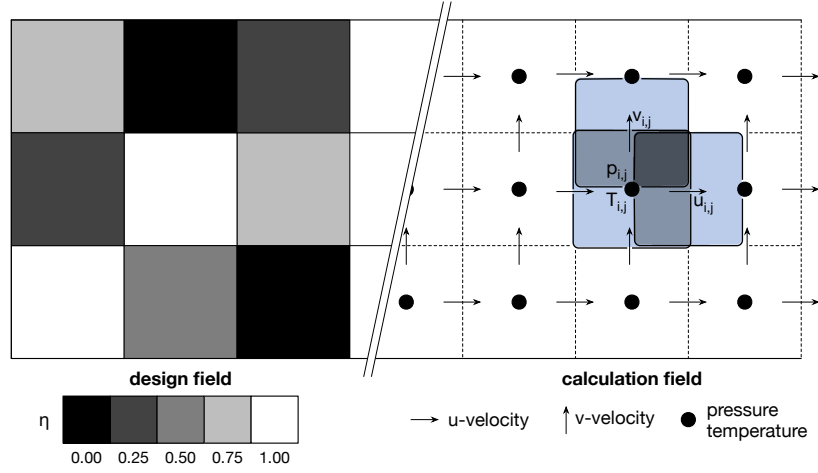
- Harmonic mean:

$$\tilde{\Lambda} = N \left/ \sum_{i=1}^N \frac{1}{\Lambda_i} \right. \quad (5.10)$$

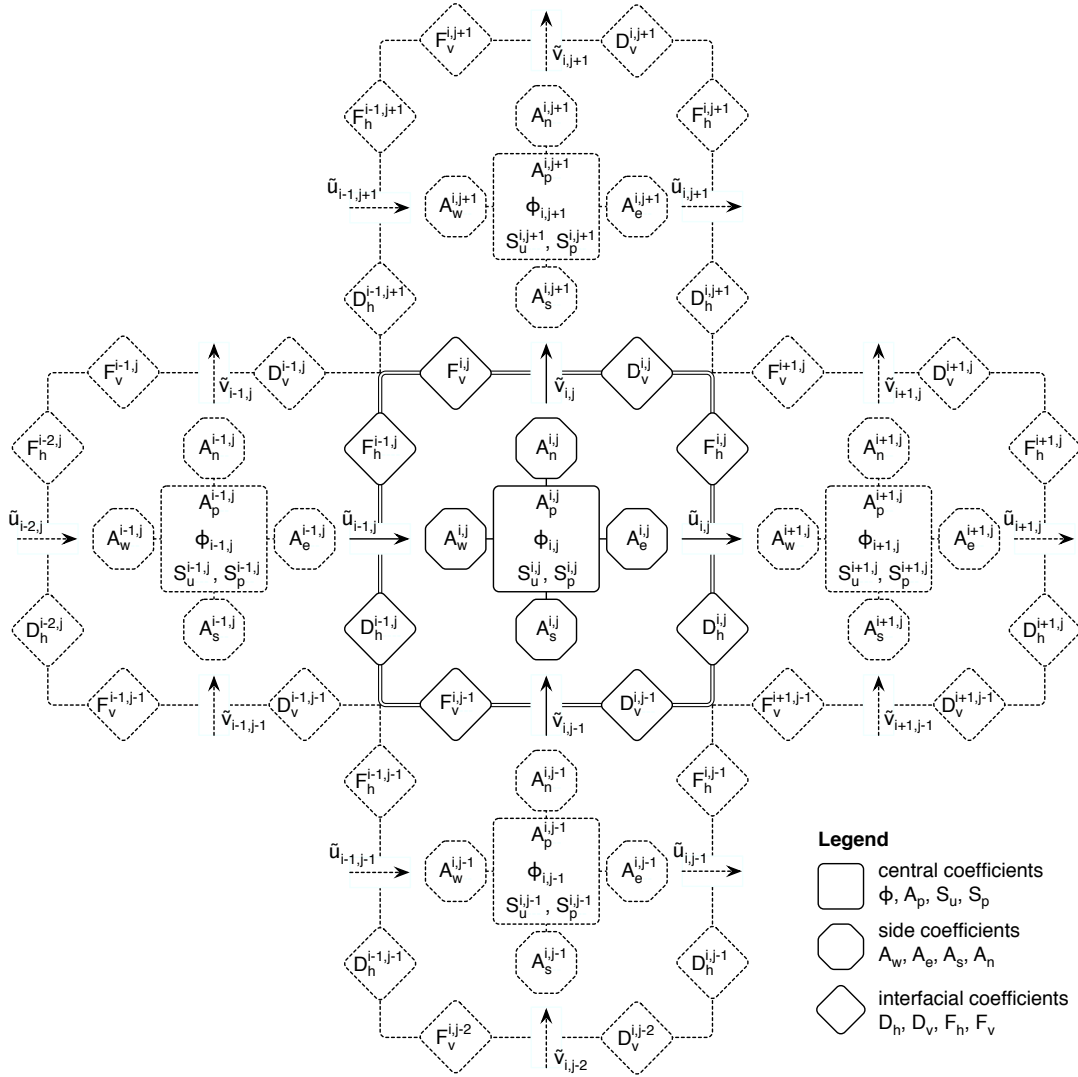
For $N = 1$, the filter does not modify the value, meaning that it is already at the right location for the calculation process. For $N = 2$, the filter provides an interfacial value based on the two closest data available, which is the majority of cases. For $N = 4$, the value filtered is exactly based between 4 control volumes, providing their arithmetic or harmonic mean. It is worth noting that this article only involves arithmetic filters as recommended in [96], except if it is explicitly stated otherwise.

Following these assumptions and for the control volume $\phi_{i,j}$ displayed in Fig. 5.3b, the discretized form of Eq. (5.8) is (see [96] for further details):

$$\begin{aligned} A_p^{i,j} \phi_{i,j} &= A_w^{i,j} \phi_{i-1,j} + A_e^{i,j} \phi_{i+1,j} + A_s^{i,j} \phi_{i,j-1} + A_n^{i,j} \phi_{i,j+1} + S_u^{i,j} \\ \text{with } A_p^{i,j} &= A_w^{i,j} + A_e^{i,j} + A_s^{i,j} + A_n^{i,j} + F_h^{i,j} - F_h^{i-1,j} + F_v^{i,j} - F_v^{i,j-1} + S_p^{i,j} \end{aligned} \quad (5.11)$$



(a) Cartesian grids: design parameters η defining α , k , and q scalars (left) beside FVM staggered grid storing u - and v -velocities, as well as pressure and temperature scalars (right).



(b) Spatial distribution of coefficients involved in the discretization process of a $\phi_{i,j}$ control volume.

Figure 5.3: Staggered grid and discretization coefficients for FVM.

where A_w , A_e , A_s , and A_n are the coefficients weighting the influence of the four surrounding control volumes. They strongly depend on the numerical scheme used to approximate the value ϕ on each face of the control volume $\phi_{i,j}$: Central Differencing Scheme (CDS), Upwind Differencing Scheme (UDS), Hybrid Differencing Scheme (HDS), and so on. For the purpose of this study, and regardless of the transportiveness and accuracy problems pointed out in [96], a CDS has been selected on account of its differentiable and continuous formulation. Consequently, and taking into account that such a scheme is only suitable for low Reynolds numbers, coefficients A are evaluated as follows:

$$\begin{cases} A_w^{i,j} = D_h^{i-1,j} + \frac{1}{2} F_h^{i-1,j} \\ A_e^{i,j} = D_h^{i,j} - \frac{1}{2} F_h^{i,j} \\ A_s^{i,j} = D_v^{i,j-1} + \frac{1}{2} F_v^{i,j-1} \\ A_n^{i,j} = D_v^{i,j} - \frac{1}{2} F_v^{i,j} \end{cases} \quad (5.12)$$

where $F_{h/v}$ and $D_{h/v}$ represent respectively the influence of convective and diffusive transport. S_u and S_p stands for the source terms that are constant and linearly dependent on $\phi_{i,j}$ value. Each term can be expressed as:

$$\begin{cases} F_h^{i,j} = \beta \Delta y \tilde{u}_{i,j} \\ F_v^{i,j} = \beta \Delta x \tilde{v}_{i,j} \end{cases} \quad \begin{cases} D_h^{i,j} = \frac{\Delta y}{\Delta x} \tilde{\delta}_{i,j} \\ D_v^{i,j} = \frac{\Delta x}{\Delta y} \tilde{\delta}_{i,j} \end{cases} \quad \begin{cases} S_u^{i,j} = \Delta x \Delta y \zeta_{i,j} \\ S_p^{i,j} = \Delta x \Delta y \tilde{\gamma}_{i,j} \end{cases} \quad (5.13)$$

It is worth noting that β coefficient does not require to be discretized since its value never depends on its location: $\beta_u = \beta_v = \rho$ and $\beta_T = \rho C_p$. Moreover ζ coefficient needs not to be filtered since $q_{i,j}$ is stored at the center of the $T_{i,j}$ control volume, therefore $\zeta_T^{i,j} = q_{i,j}$. In addition, it approximates the gradient of pressure $-\nabla p$ thanks to a first order difference scheme, such as:

$$\zeta_u^{i,j} = -\frac{P_{i+1,j} - P_{i,j}}{\Delta x} \quad \text{and} \quad \zeta_v^{i,j} = -\frac{P_{i,j+1} - P_{i,j}}{\Delta y} \quad (5.14)$$

After applying the suitable boundary conditions to $\partial\Omega$ by means of fixed or penalization values, a system of equations is established by assembling the N_ϕ equations over its calculation grid, such as: $\mathbf{A}_\phi \cdot \phi = \mathbf{B}_\phi$. Within this context, \mathbf{A}_ϕ is a non-symmetrical pentadiagonal band matrix made of coefficients A , and ϕ and \mathbf{B}_ϕ are two vectors respectively built from the field $\phi_{i,j}$ and the source terms $S_u^{i,j}$. This system can be solved using the Biconjugate Gradient Stabilized method (BiCGSTAB) [127]. In addition, it is worth noting that S_p , and consequently A_p , terms coming from u - and v -velocity component discretization may have large values due to the important penalization of α for the solid subdomains. Therefore matrices \mathbf{A}_u and \mathbf{A}_v are strongly diagonally dominant and using a BiCGSTAB method in conjunction with a Jacobi preconditioner drastically speed up the algorithm convergence.

The iterative solution strategy selected to solve the pressure-velocity coupling is the so-called SIMPLER algorithm, which lies on the continuity Eq. (5.1) to build both pressure and pressure correction equations [96]. Since the energy Eq. (5.3) does not include a dissipation function taking into account an internal energy source due to the deformation work on the fluid particles, it can be uncoupled from the resolution of velocity-pressure equations. Therefore, the FVM solver provides the solution of the following system: $\mathbf{R}(\mathbf{X}, \eta) = \mathbf{0}$, defined as:

$$\mathbf{R}(\mathbf{X}, \eta) = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_u \\ \mathbf{R}_v \\ \mathbf{R}_p \\ \mathbf{R}_T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_u \cdot \mathbf{U} - \mathbf{B}_u \\ \mathbf{A}_v \cdot \mathbf{V} - \mathbf{B}_v \\ \mathbf{A}_p \cdot \mathbf{P} - \mathbf{B}_p \\ \mathbf{A}_T \cdot \mathbf{T} - \mathbf{B}_T \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

where η is the design parameter vector holding the field $\eta_{i,j}$. Moreover, vectors U , V , P , and T storing the velocity, pressure, and temperature fields are united into a global one, called $\mathbf{X}^t = (U, V, P, T)$.

5.3.2.2 Shear force correction for solid domain

In order to investigate the capability of the FVM introduced so far, a channel is modeled to replicate the Poiseuille flow condition between two solid subdomains, as illustrated on Fig. 5.4a. Similarly as Guest and Prévost in [60], the main motivation is to test the capability of Ω_s subsets to replicate the no-slip condition along its boundaries. The whole Ω domain has a $5\ell \times 2\ell$ rectangular shape, with both west and east boundaries subject to an inlet and outlet parabolic flows such as $u_i(y)/\bar{u}_i = u_o(y)/\bar{u}_o = 1 - (1 - y/\ell)^2$. In addition, south and north edges are subject to a no-slip wall boundary condition, which leads, if Ω domain were exclusively fluid ($\eta = 1$), to a longitudinal pressure gradient $\Delta p = 10 \mu \bar{u}_i/\ell$.

Two solid subdomains are added, defined by $\Omega_s : \mathbf{x} \in [\ell, 3\ell] \times ([0, 0.5\ell] \cup [1.5\ell, 2\ell])$ and pictured in black areas on Fig. 5.4a, such that the initial Poiseuille flow is forced between both of them. Therefore, the central flow must also adopts a Poiseuille velocity profile characterized by a maximum velocity of $2\bar{u}_i$. Both velocity profiles obtained from the current FVM parametrization (\square) and the theoretical analysis ($-$) are plotted at $x = 2.5\ell$ and for $y \in [0, 2\ell]$ on Fig. 5.4b. It appears that the current formulation slightly underestimates the central velocity, which is attested by the ratio $\bar{u}_{x=2.5\ell}/\bar{u}_i$ being equal to 1.95 instead of 2. However, it is worth noting that for $\mathbf{x} \in \Omega_s$, $\mathbf{u}(\mathbf{x}) \rightarrow \mathbf{0}$: all the fluid does flow between the two solid congestions and the deficit of velocity cannot be attributed to these artificial porous media.

Figure 5.4d provides a zoom on the solid/fluid interface and shows that the near wall velocity is largely overestimated. This behavior is expected since no treatment is applied to take into account the wall shear stress along the solid domain. Assuming that the velocity varies linearly with its distance from the wall, the Φ_u and Φ_v shear forces are, for a cartesian grid of unchanging size and for two-dimensional configurations ($\Delta z \equiv 1$):

$$\Phi_u = -2\mu \frac{\Delta x}{\Delta y} u_p \quad \text{and} \quad \Phi_v = -2\mu \frac{\Delta y}{\Delta x} v_p \quad (5.16)$$

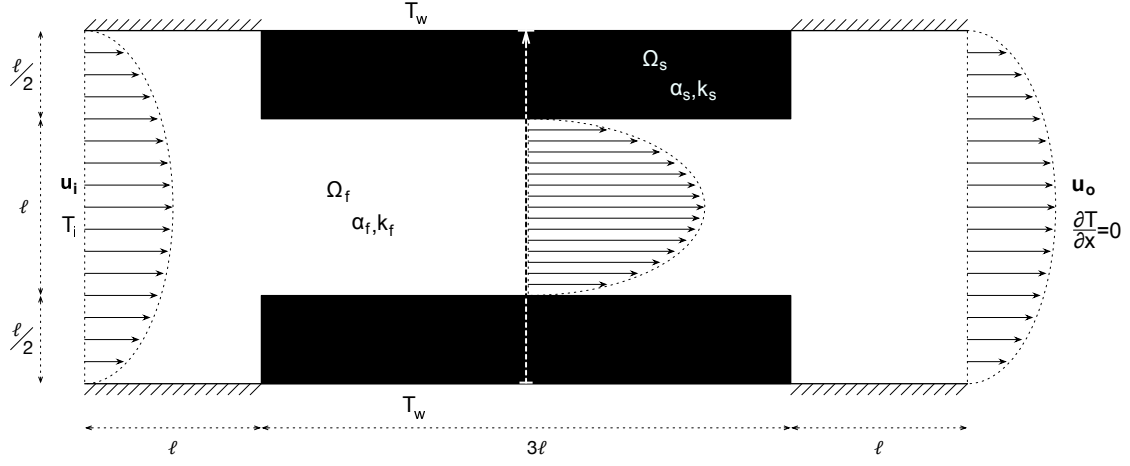
where u_p and v_p are the velocities at the first grid node along the solid interface. Therefore, it is required to add these forces into the $S_{p,u}$ and $S_{p,v}$ source terms, both being only equal to $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \tilde{\alpha}$ at this point, in order to accurately simulate the flow pattern in the near wall areas. Nevertheless, since the design parameters η can take intermediate states between 0 and 1, the shear forces must be balanced depending on the state of the nearby design parameters.

With that end, a new scalar field θ is created from Eq. (5.7) with its extreme values $\theta_s = 1$ and $\theta_f = 0$. If the control volume is fluid, $\theta(\eta = 1) = 0$, and conversely if the control volume is solid $\theta(\eta = 0) = 1$. As mentioned in the subsection 5.3.1.2, $\theta(\eta)$ is convex for $\eta \in [0, 1]$ and its convexity degree is controlled by the scalar p_f . After reduction, θ can be written as:

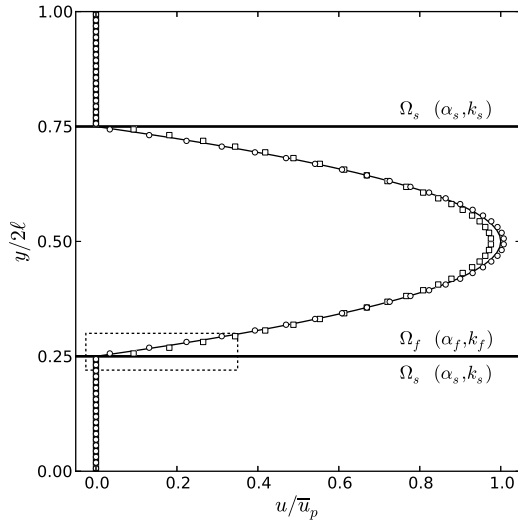
$$\theta(\eta) = p_f \frac{1 - \eta}{p_f + \eta} \quad \text{with} \quad 0 \leq \eta \leq 1 \quad \text{and} \quad p_f > 0 \quad (5.17)$$

Both Figs. 5.5a and 5.5b picture 4 gray-colored design elements of which depend on the final shear force applied to the central $u_{i,j}$ and $v_{i,j}$ control volumes. Each design element only shares an half interface with the middle velocity component, leading to total shear forces equal to:

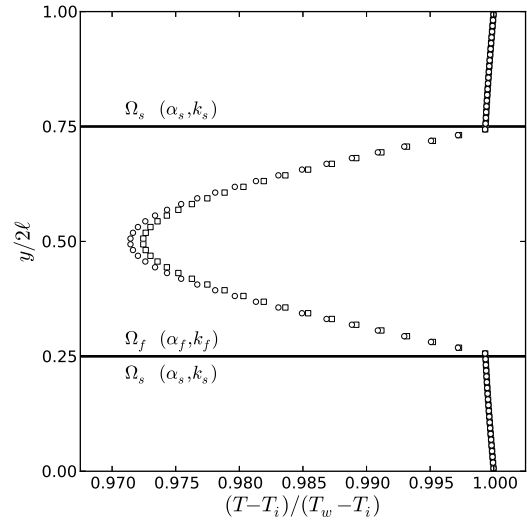
$$\begin{cases} \Phi_u^{i,j} &= \frac{1}{2} \Phi_u(\theta_{i,j-1} + \theta_{i+1,j-1} + \theta_{i,j+1} + \theta_{i+1,j+1}) \\ \Phi_v^{i,j} &= \frac{1}{2} \Phi_v(\theta_{i-1,j} + \theta_{i+1,j} + \theta_{i-1,j+1} + \theta_{i+1,j+1}) \end{cases} \quad (5.18)$$



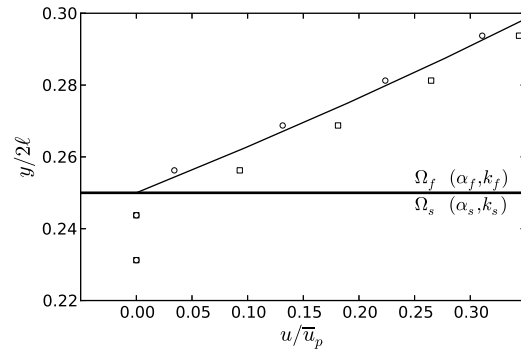
(a) Physical and geometrical configurations. Velocity and temperature profile axis for $x = 5\ell/2$.



(b) Adimensionalized u -velocity profile.



(c) Adimensionalized temperature profile.



(d) Zoom on the solid/fluid interface for the adimensionalized u -velocity profile.

Figure 5.4: Test case recreating the Poiseuille flow conditions between two solid domains. Legend: analytical Poiseuille solution (—), FVM solution without (□) and with (○) shear force correction along the solid/fluid interface.

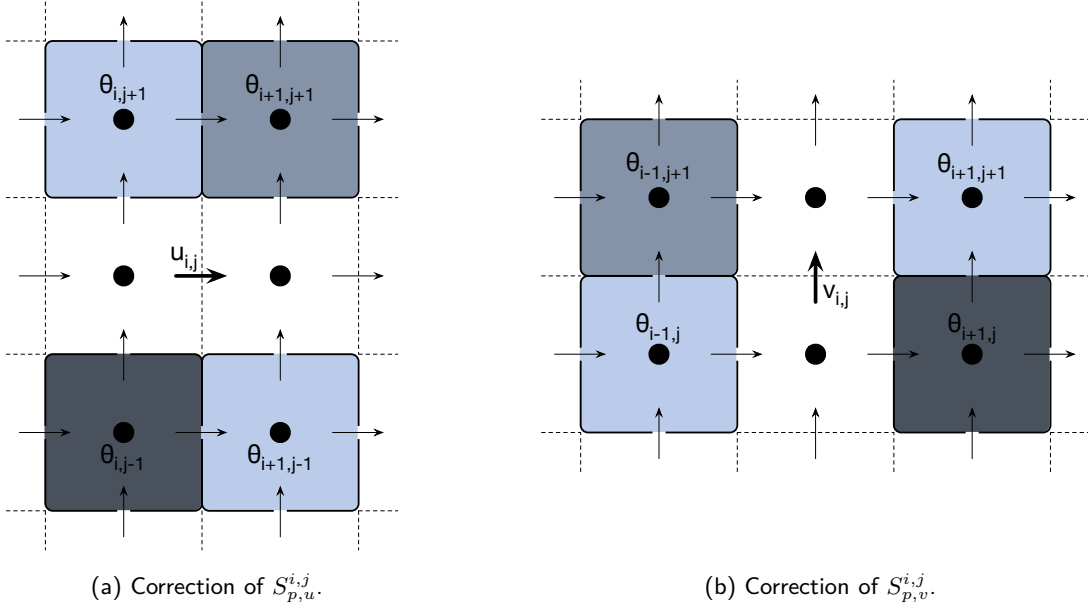


Figure 5.5: θ -values involved in the correction process of $S_p^{i,j}$ terms for u - and v -velocities.

Note that if all $\theta_{i,j}$ control volume are fluid, no shear force is applied to $u_{i,j}$ or $v_{i,j}$. Conversely, if all of them are solid, the shear force applied is $2\Phi_u$ or $2\Phi_v$, since friction takes place for both sides of $u_{i,j}$ or $v_{i,j}$ control volumes. Integrating Eqs. (5.16) and (5.18) into $S_{p,u}^{i,j}$ and $S_{p,v}^{i,j}$ terms of Eq. (5.13) leads to:

$$\begin{cases} S_{p,u}^{i,j} = \Delta x \Delta y \tilde{\alpha}_{i,j} + \mu \frac{\Delta x}{\Delta y} (\theta_{i,j-1} + \theta_{i+1,j-1} + \theta_{i,j+1} + \theta_{i+1,j+1}) \\ S_{p,v}^{i,j} = \Delta x \Delta y \tilde{\alpha}_{i,j} + \mu \frac{\Delta y}{\Delta x} (\theta_{i-1,j} + \theta_{i+1,j} + \theta_{i-1,j+1} + \theta_{i+1,j+1}) \end{cases} \quad (5.19)$$

The new velocity profile (\circ) is plotted on Figs. 5.4b and 5.4d and demonstrates a better accuracy with the correction of source terms than without it. From now on, $\bar{u}_{x=2.5\ell}/\bar{u}_i = 2.01$ which underlines that the maximum velocity is slightly overestimated. Indeed, the first fluid node does integrate the shear force thanks to the corrective term, but the diffusive term D_v along its interface is not disconnected as it should be for a standard wall. Consequently, the S_p terms are moderately overestimated, leading to underestimate the near wall velocity. It is also worth noting that due to the transport mechanism based on \mathbf{u} vector field, the temperature profile inside the fluid domain is also impacted by the changes in the velocity profile, as displayed on Fig. 5.4c. Note that a constant temperature boundary condition $T_w > T_i$ is applied to the top and the bottom of solid subdomains: the temperature profiles in these regions are linear, as required through an infinite wall subject to a constant temperature for one side and to a convective heat transfer for the other side.

5.3.3 Sensitivity analysis

This section investigates the discrete adjoint approach, in conjunction with FVM and its discretization, to establish the sensitivity of an objective function f . This is required by the numerical optimization algorithm and comes down to evaluating the derivative of f with respect of design parameters η . The approach is divided into three parts: in the first place, a general formulation is introduced, detailing the terms of the sensitivity solver, which are not dependent on the objective function. Then, two objective functions related to the optimization problem stated in Eq. (5.6) are integrated in the sensitivity analysis step. In the end, rescaling and linear combination of objective functions are established in order to deal properly with the multi-objective nature of such problems.

5.3.3.1 General formulation

Consider an objective function $f(\mathbf{X})$ to be minimized, subject to $\mathbf{R}(\mathbf{X}, \boldsymbol{\eta}) = 0$ such as defined in Eq. (5.15). This class of problem is often handled by introducing the Lagrange function \mathcal{L} and reformulating the objective function as:

$$\mathcal{L}(\mathbf{X}, \boldsymbol{\eta}) = f(\mathbf{X}) + \underbrace{\boldsymbol{\lambda}^t \cdot \mathbf{R}(\mathbf{X}, \boldsymbol{\eta})}_{=0} \quad (5.20)$$

where the additional variable $\boldsymbol{\lambda}^t = (\lambda_u, \lambda_v, \lambda_p, \lambda_T)$ is the adjoint vector, with the same dimension as the \mathbf{X} vector. Note that if \mathbf{X} satisfied Eq. (5.15), then the Lagrange function is equal to the initial objective function. By differentiating Eq. (5.20) with respect to η_i , $i \in \llbracket 1, N_\eta \rrbracket$, the derivative of \mathcal{L} is:

$$\frac{d\mathcal{L}}{d\eta_i} = \frac{df}{d\eta_i} + \boldsymbol{\lambda}^t \frac{d\mathbf{R}}{d\eta_i} \quad (5.21)$$

Each derivative term can be developed using the chain rule of multivariable functions:

$$\begin{cases} \frac{df}{d\eta_i} = \frac{\partial f}{\partial \eta_i} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \eta_i} \\ \frac{d\mathbf{R}}{d\eta_i} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \eta_i} + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{X}} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \eta_i} \end{cases} \quad (5.22)$$

Noting that $\partial f / \partial \eta_i = 0$ since all the objective functions investigated through this study do not depend on η field and integrating both Eqs (5.22) into Eq. (5.21) leads to:

$$\frac{d\mathcal{L}}{d\eta_i} = \boldsymbol{\lambda}^t \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \eta_i} + \left[\frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} + \boldsymbol{\lambda}^t \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{X}} \right] \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \eta_i} \quad (5.23)$$

after rearranging the equation to factorize the term $\partial \mathbf{X} / \partial \eta_i$. Therefore, its evaluation is pointless, which is the main advantage of the adjoint method, if $\boldsymbol{\lambda}$ is the solution of the following system of equations:

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} + \boldsymbol{\lambda}^t \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{X}} = 0 \Leftrightarrow \left(\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{X}} \right)^t \boldsymbol{\lambda} = - \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \right)^t \quad (5.24)$$

which is known as the adjoint equation. Once the adjoint variable is evaluated, the sensitivity of the objective function can be established thanks to:

$$\frac{df}{d\boldsymbol{\eta}} = \boldsymbol{\lambda}^t \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \boldsymbol{\eta}} \quad (5.25)$$

The sensitivity analysis step relies on two matrices: $\partial \mathbf{R} / \partial \mathbf{X}$ for the adjoint solver and $\partial \mathbf{R} / \partial \boldsymbol{\eta}$ for the derivative evaluation. Both matrices can be detailed as:

$$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{X}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{R}_u}{\partial U} & \frac{\partial \mathbf{R}_u}{\partial V} & \frac{\partial \mathbf{R}_u}{\partial P} & 0 \\ \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial U} & \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial V} & \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial P} & 0 \\ \frac{\partial \mathbf{R}_p}{\partial U} & \frac{\partial \mathbf{R}_p}{\partial V} & \frac{\partial \mathbf{R}_p}{\partial P} & 0 \\ \frac{\partial \mathbf{R}_T}{\partial U} & \frac{\partial \mathbf{R}_T}{\partial V} & 0 & \frac{\partial \mathbf{R}_T}{\partial T} \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{R}_u}{\partial \eta} \\ \frac{\partial \mathbf{R}_v}{\partial \eta} \\ \frac{\partial \mathbf{R}_p}{\partial \eta} \\ \frac{\partial \mathbf{R}_T}{\partial \eta} \end{pmatrix} \quad (5.26)$$

It is worth noting that the derivatives of \mathbf{R}_u , \mathbf{R}_v , and \mathbf{R}_p with respect to T are zero since these residuals do not depend on the temperature field. In a similar manner, $\partial \mathbf{R}_T / \partial P = 0$, since \mathbf{R}_T is only function of U , V , and T . Assuming that the design field η involves $m \times n$ elements over a

staggered calculation grid (see Fig. 5.3a), then $\partial \mathbf{R} / \partial \mathbf{X}$ is a square matrix of $N_X \times N_X$ elements, where $N_X = 4mn - m - n$. Alternatively, $\partial \mathbf{R} / \partial \boldsymbol{\eta}$ is a rectangular matrix involving $N_X \times N_\eta$ elements, with $N_\eta = mn$. The derivatives of residuals \mathbf{R}_ϕ inherits the high-level of sparsity from their pentadiagonal band matrix \mathbf{A}_ϕ . Consequently, both $\partial \mathbf{R} / \partial \mathbf{X}$ and $\partial \mathbf{R} / \partial \boldsymbol{\eta}$ matrices are sparse as underlined by their binary representation on Fig. 5.6: their fill ratio for the cases investigated in the last section is usually less than 0.2%. The format selected to handle their sparsity pattern is based on the so-called list of lists scheme (LIL) for efficient creation and modification. Once the matrix is assembled, the LIL format is converted to the Compressed Sparse Column format (CSC) for efficient matrix-vector and transposed matrix-vector products.

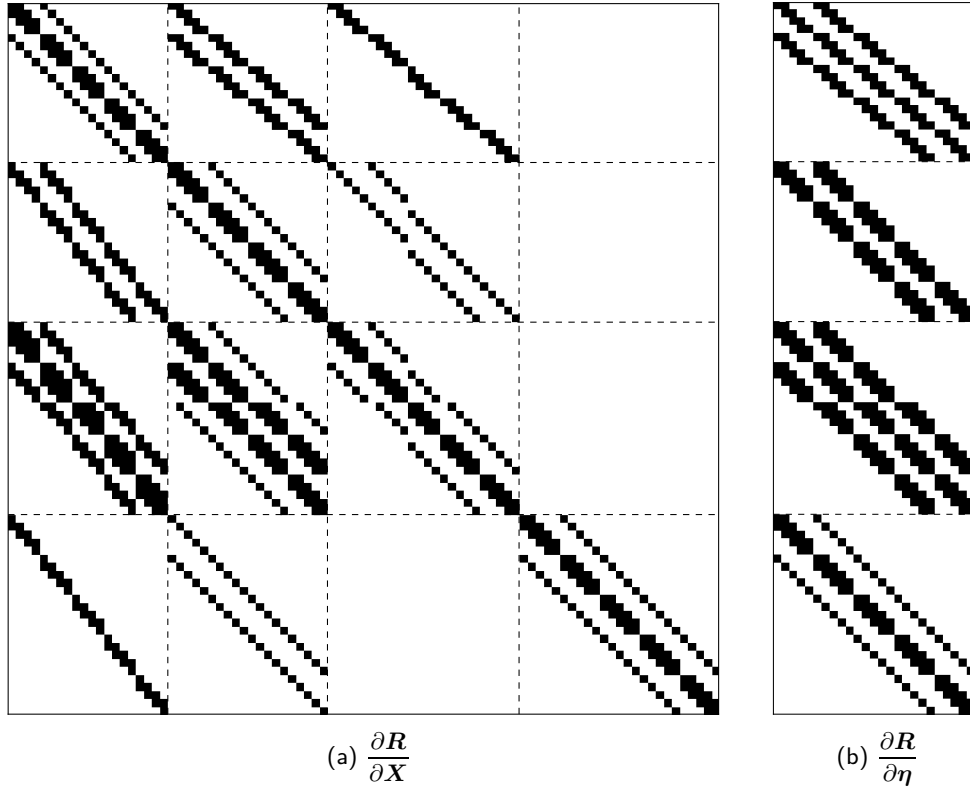


Figure 5.6: Binary representation of the two main matrices involved in the adjoint problem for a 5×5 design grid.

The assembly of both matrices lies on the derivatives of $\mathbf{R}_\phi = \mathbf{A}_\phi \cdot \boldsymbol{\phi} - \mathbf{B}$ subject to a vector $\boldsymbol{\psi}$, where $\boldsymbol{\phi}$ can be \mathbf{U} , \mathbf{V} , \mathbf{P} or \mathbf{T} and $\boldsymbol{\psi}$ can be $\boldsymbol{\phi}$ or $\boldsymbol{\eta}$. Therefore, the challenge is to derivate the following generic expression:

$$\frac{\partial \mathbf{R}_\phi}{\partial \boldsymbol{\psi}} = \frac{\partial \mathbf{A}_\phi \cdot \boldsymbol{\phi}}{\partial \boldsymbol{\psi}} - \frac{\partial \mathbf{B}_\phi}{\partial \boldsymbol{\psi}} \quad (5.27)$$

where the delicate part is to evaluate the term $\partial \mathbf{A}_\phi \cdot \boldsymbol{\phi} / \partial \boldsymbol{\psi}$. Among different strategies, a convenient formulation for programing purposes is the following:

$$\frac{\partial \mathbf{A}_\phi \cdot \boldsymbol{\phi}}{\partial \boldsymbol{\psi}} = \left(\begin{array}{cccc} \frac{\partial \mathbf{A}_\phi}{\partial \psi_1} \cdot \boldsymbol{\phi} & \frac{\partial \mathbf{A}_\phi}{\partial \psi_2} \cdot \boldsymbol{\phi} & \cdots & \frac{\partial \mathbf{A}_\phi}{\partial \psi_N} \cdot \boldsymbol{\phi} \end{array} \right) + \begin{cases} \mathbf{0} & \text{if } \boldsymbol{\psi} \neq \boldsymbol{\phi} \\ \mathbf{A}_\phi & \text{if } \boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{\phi} \end{cases} \quad (5.28)$$

The evaluation of each term $(\partial \mathbf{A}_\phi / \partial \psi_i) \cdot \boldsymbol{\phi}$ is studied by Marck *et al.* in [118]. For this derivative process, both numerical filters for staggered grids and boundary conditions required a special attention, but simplifications are possible by taking advantage of generic programming possibilities. However, these details are beyond the scope of this article.

Several different test cases indicate that a realistic approximation of the lower bound of $\partial \mathbf{R} / \partial \mathbf{X}$ condition number is 10^8 , meaning that this matrix is particularly *ill-conditioned*. This observation is corroborated by the fact that unconditioned or Jacobi-preconditioned iterative solvers fail to solve the adjoint Eq. (5.24). To work around this difficulty, an incomplete LU factorization (ILU) is used as a preconditioner for the GMRES iterative solver. ILU subroutine comes from SuperLU libraries for solving sparse linear systems [128], which also provides several algorithms for solving them by sparse Gaussian elimination. This direct method has been implemented as well, as a backup strategy in case the ILU-GMRES solver fails.

5.3.3.2 Objective functions

The second challenge of the adjoint method is to evaluate the derivative $\partial f / \partial \mathbf{X}$ involving the objective function, which constitutes the right-hand side term of the adjoint equation. Both objective functions investigated through this study take place at the inlet and outlet flow boundary conditions, denoting $\Gamma = \partial \Omega_f$ for the sake of simplicity. The first objective function f_d is relative to minimizing the power dissipated by the fluid through the domain Ω and can be evaluated on the basis of total pressure losses:

$$f_d(\mathbf{u}, P) = \int_{\Gamma} -\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} \left(P + \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 \right) d\Gamma \quad (5.29)$$

It is worth noting that u and v boundary velocity components exactly belong to Γ thanks to their respective staggered grid. However, the pressure nodes are not directly held by Γ , since they are located half of the mesh size inward the domain, but no relevant data is available to precisely estimate them on the boundary. Consequently, the near boundary pressure is used when discretizing Eq. (5.29), making the f_d discretization process effortless. In addition, it is also worth pointing out that f_d does not involve to know the temperature field for its evaluation. Therefore, the energy equation needs not to be solved, as well as the temperature adjoint variable λ_T , reducing the matrix $\partial \mathbf{R} / \partial \mathbf{X}$ to its 3×3 upper left terms and accordingly speeding up the calculation process.

The second objective function f_r is relative to maximizing the recoverable thermal power from the domain Ω by means of the inlet and outlet flow boundary conditions. This net power is given by:

$$f_r(\mathbf{u}, T) = \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} (\rho C_p T) d\Gamma \quad (5.30)$$

The same remarks as previously apply to the discretization of \mathbf{u} velocity field. Nevertheless, the boundary conditions for the temperature field are applied outside the calculation grid, contrarily to the ones for the pressure field, and allows to linearly interpolate the temperature values to locate them exactly on the boundary Γ . For the inlet flows, the input temperature T_i is used in conjunction with the near boundary temperature, whereas the outlet flows, which are characterized by $\partial T / \partial n = 0$, involves only the last control volume values of the calculation grid.

5.3.3.3 Multi-objective optimization

The previous subsection introduced two different objective functions based on the flow configuration and the energy transport, respectively named f_d and f_r . In bi-objective optimization, the challenge is to simultaneously take advantage of both objective functions, *i.e.* considering a trade-off from these two criteria leading to a not unique solution. Regarding the dissipated and recoverable powers, a trade-off means that further maximization of the recoverable power by the fluid involves increasing the pressure drop, and conversely. The set of solutions that requires a trade-off to be improved is well known as the Pareto front [123] and can be reached by using an Aggregated Objective Function (AOF), also known as the weighted-sum approach, which is based on a linear combination of both objective functions. As detailed by Athan and Papalambros [124], this method can only generate the convex part of the Pareto frontier: for the purpose of this study, convexity is assumed and will be checked a posteriori.

Preparatory to linearly combining them, both objective functions must be rescaled to have the same order of magnitude, in order to reach an homogenous distribution of samples along the Pareto frontier. The rescaling strategy is:

$$\hat{f} = \frac{f - \underline{f}}{\overline{f} - \underline{f}} \quad (5.31)$$

where f can be f_d or f_r . The other 4 parameters are determined by solving independently both optimization problems (5.6) for $\min f_d$ and $\max f_r$; minimizing f_d with respect to the maximal porosity provides $\underline{f_d}$ and $\underline{f_r}$, whereas maximizing f_r brings the values of $\overline{f_d}$ and $\overline{f_r}$. Consequently, both rescaled objective functions $\hat{f_d}$ and $\hat{f_r}$ theoretically range between 0 and 1 and the points $(\underline{f_d}, \underline{f_r})$ and $(\overline{f_d}, \overline{f_r})$ are the limits of the Pareto frontier.

Such a parametrization allows considering the following linear combination:

$$f = -w\hat{f_r} + (1 - w)\hat{f_d} \quad (5.32)$$

where w is the weight balancing the influence of each objective function ($w \in [0, 1]$). Note that this combination involves the opposite of f_r function, since the optimization algorithm aims at minimizing the combinatory function f . The derivative of function f can be easily computed as:

$$\frac{df}{d\eta} = -\frac{w}{\overline{f_r} - \underline{f_r}} \frac{df_r}{d\eta} + \frac{1 - w}{\overline{f_d} - \underline{f_d}} \frac{df_d}{d\eta} \quad (5.33)$$

Since each weighting provides a different solution, it is required to test different value of w in order to reach a satisfactory structure for the decision maker. Thanks to high parallelization abilities, calculations including a set of 101 different weights are conjointly run in order to capture the Pareto frontier, working around the expensive computational time of this method.

Due to the multiplicity of parameters, a subroutine performing the sensitivity analysis with a finite-difference method has been developed to crosscheck the result of the adjoint solver. Using a center difference scheme, the derivative of f subject to η_i is:

$$\frac{df}{d\eta_i} \approx \frac{f(\eta_i + \Delta\eta) - f(\eta_i - \Delta\eta)}{2\Delta\eta} \quad (5.34)$$

where $\Delta\eta$ is sufficiently small ($\approx 10^{-4}$). This method is only performed for small design parameter fields including less than 10×10 elements because of its expensive calculation cost.

5.3.4 Method of Moving Asymptotes

Once the FVM and adjoint solvers established the objective function and its derivative, a numerical optimization method lying on these values allows the update of the design parameters η . As highlighted by the last column of Tab. 5.1, the Method of Moving Asymptotes (MMA), developed by Svanberg in [129], is widely used in topology optimization due to its ability to avoid the main local optima while ensuring a fast convergence speed. It belongs to a comprehensive class of optimization methods, based on Conservative Convex Separable Approximations (CCSA), which are intended for inequality-constrained nonlinear programming problems [122].

MMA strategy solves a sequence of subproblems generated from local and convex approximations of the objective function and its constraints, based on their direct values and their derivatives. The only constraint tackled in this study is relative to the maximal number of fluid cells allowed through the domain Ω and is evaluated by means of the global discrete porosity:

$$\varphi(\eta) = \frac{1}{N_\eta} \mathbf{1}^t \eta \Rightarrow \frac{d\varphi}{d\eta} = \frac{1}{N_\eta} \mathbf{1} \quad (5.35)$$

where $\mathbf{1}^t = (1, 1, \dots, 1)$ is a vector of size N_η . Therefore, the constraint can be expressed as $\varphi(\boldsymbol{\eta}) \leq \bar{\varphi}$. Considering a MMA iteration k at a point $\boldsymbol{\eta}^k$, a local convex subproblem is formulated on the basis of f , $df/d\boldsymbol{\eta}$, φ , and $d\varphi/d\boldsymbol{\eta}$ values and is solved thanks to a primal-dual point interior method [130]. This leads to a new point $\boldsymbol{\eta}^{k+1}$, where the objective and constraint functions, as well as their gradients, should be calculated again. The strength of the MMA resides in its asymptotes determining the accuracy of the subproblem approximation which are wisely adapted during the convergence process.

5.4 Results

This section introduces the results and could be divided into two categories: at first, three representative cases of topology optimization in fluid dynamics are investigated, in order to check the adequacy of FVM against the results coming from the dedicated scientific literature. Second, a full bi-objective configuration involving f_d and f_r is examined. The four cases have been evaluated with $\mu = 0.001 \text{ Pa.s}$, $\rho = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$ and without any heat production $q_s = q_f = 0 \text{ W/m}^3$. The other parameters are independently specified for each case.

5.4.1 Diffuser

The first example is the diffuser case investigated in [56, 60] and depicted on Fig. 5.7a. The problem is introduced in its dimensionless form: the design domain Ω have a square-shaped of side length $\ell = 1$ and the maximum global porosity is fixed to $\bar{\varphi} = 0.5$. The whole west side is subject to a parabolic boundary condition with a maximum adimensional velocity of $\bar{u}_i = 1$. The outlet boundary condition is located in the middle of the east side, but covering only $1/3$ of its length. Consequently, $\bar{u}_o = 3$ in order to ensure the mass continuity through the whole domain. All the other bounds are assumed to be stationary walls with a no-slip boundary condition. The coefficient α ranges from 10^{-1} to 10^5 and the energy equation is not taken into consideration. The Reynolds number characterizing the flow, based on the length ℓ and the average inlet velocity, is $Re_\ell = 32$.

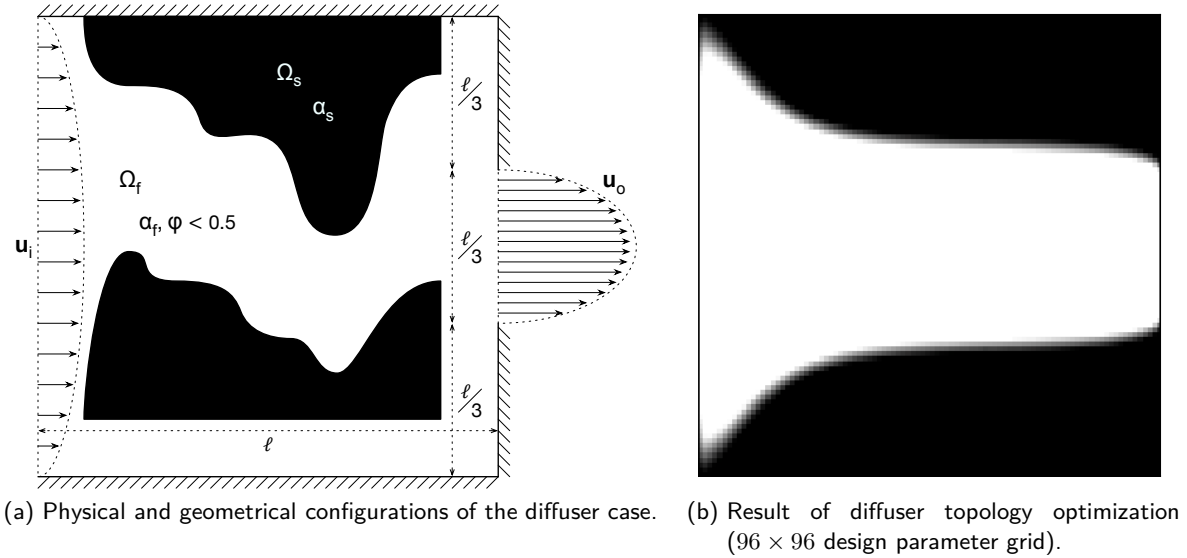


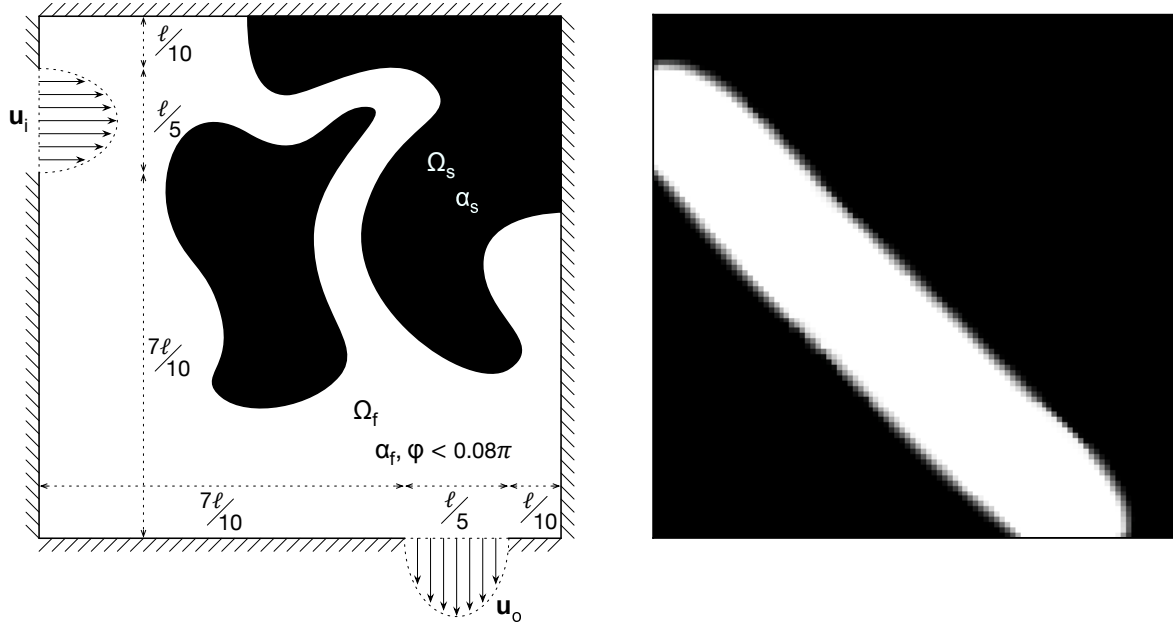
Figure 5.7: Minimization of the pressure drop for a diffuser.

The structure is optimized over a grid made of 96×96 design parameters and is shown in Fig. 5.7b: it is similar by all its aspects to the structure presented by Borrvall and Petersson in [56]. The optimization has also been carried out over a coarser grid involving only 48×48 elements and the

result shows no mesh dependency, with the exception of the fluid/solid interface smoothness, which is consistent with the observations made in [56,60]. The diffuser configuration has also allowed the study of the influence of the α numerical filter on the optimal design. Contrary to the arithmetic filter, the structures evaluated with an harmonic filter are affected with a checkerboard problem along its fluid/solid interface. Indeed, for two variables $\underline{\alpha} \ll \overline{\alpha}$, the harmonic filter tends to $\tilde{\alpha} \rightarrow \underline{\alpha}$ due to its mathematical formulation. Consequently, it always minimizes the impact of solid elements on the fluid flow along its boundaries, making the convergence uneasy for such areas. This statement proscribes the use of this specific filter without an appropriate strategy in order to avoid the checkerboard problems, which is beyond the scope of this article.

5.4.2 Bend pipe

The second example is the bend pipe pictured on Fig. 5.8a and has been studied in [56,58,72]. The computational domain Ω is also square-shaped, with an adimensional side $\ell = 1$, and the design grid is made of 100×100 elements. Boundaries are constituted of non-moving walls, with the exception of the north-west and south-east corners that are subject to parabolic inlet and outlet flows, following their respective normal direction. The width of both flow boundary conditions is set to $\ell/5$. The maximal fluid area comes from a pipe, which would link the inlet and outlet flows with a circular path having its center on the south-east corner and the same width as its openings. Therefore, $\varphi(\eta) \leq 0.08\pi$. As in the previous example, energy equation is not considered and α varies in the same range.



(a) Physical and geometrical configurations of the bend pipe case. (b) Result of bend pipe topology optimization (100×100 design parameter grid).

Figure 5.8: Minimization of the pressure drop for a bend pipe.

For the case considered, the Reynolds number based on the pipe width and the average inlet velocity is $Re_{\ell/5} = 7$. The design (Fig. 5.8b) is similar to the results reached in [56,58] for $Re_{\ell/5} \ll 1$ and $Re_{\ell/5} = 50$, namely for cases where the convective terms, or inertia, do not have a significant effect on the optimal structures. Therefore, the result is trivial, pointing out that the geometry minimizing the total dissipated power should be as straight as possible. To take properly into account inertia, further investigations based on more advanced FVM discretization scheme, such as UDS or QUICK,

are required. In addition, it is worth noting that the solid/fluid interface does not distinctly appear, since it is made of a small gradient of material pictured with a gray layer. This issue can be easily overcome by forcing the linearization of function $\alpha(\eta)$ (Eq. (5.7)), by means of p_f parameters. Indeed, the current calculation have been run with $p_f = 0.1$, and once converged, p_f could be slightly increased as far as 1 for example, to make explicit the limits between Ω_s and Ω_f subdomains. However, this additional computational cost does not lead to any design improvement and has not been carried out for the diffuser and bend pipe cases.

5.4.3 Double pipe

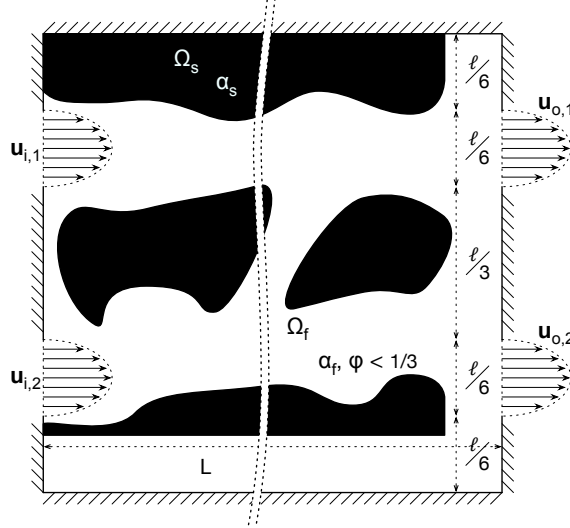
The last example based on the total dissipated power minimization is relative to the double pipe configuration investigated in [56, 60, 72]. Figure 5.9a shows how the boundary conditions are distributed around the domain Ω : each outlet flow is lined up with an inlet one and the remaining bounds are stationary walls. The aspect ratio of the computational field is equal to L/ℓ and the purpose of the optimization process is to investigate the influence of L parameter on the optimal structure. The width is discretized into $n = 48$ elements with a square-shaped aspect ratio, leading to adjust the number m of elements in function of the length L . In addition, the maximal global porosity is set to $\bar{\varphi} = 1/3$, corresponding to the volume of fluid required by two straight pipes joining the input-output flows.

Figures 5.9b and 5.9c display the results reached for short ($L = \ell$) and long ($L = 1.5\ell$) configurations. They present two very distinct topological optima: the short case is made of two fluid subdomains Ω_f , whereas the long case unified these two subdomains in the central area. In order to avoid the local optima, especially regarding the long case, the convex parameter p_f has to be carefully chosen along the calculation process. At first, optimization starts off with $p_f = 0.01$, leading to a high-level of gray material through the domain and slowing down the convergence process for examining several intermediate configurations. Then, p_f is slightly increased up to 0.1 to shape the structure, and finally up to 1 in order to clearly distinguish both domains Ω_f and Ω_s . The short configuration requires 64 iterations to fully converge, whereas the long one involves up to 207 iterations, highlighting the difficulties of the MMA algorithm to settle a valid solution.

Qualitatively, the differences between both structures are interpretable as a trade-off between the power dissipated to transport the fluid in straight sections and the one used to join and disjoin the pipes. Quantitatively, the total power dissipated by the short case is equal to $f_d = 6.42 \times 10^{-8} W$ and is theoretically computable as $6.40 \times 10^{-8} W$: both values slightly differ since $\underline{\alpha}$ is not completely equal to 0 and the small residual inverse porosity slightly increases the objective function value f_d . The long case is characterized by $f_d = 6.89 \times 10^{-8} W$, which is higher than the short configuration. However this dissipation must be put in perspective with two theoretical values:

- For two straight pipes joining the input-output flows, in a similar manner to the short case, the theoretical dissipation function is equal to $9.60 \times 10^{-8} W$, much higher than the one with the pipe unification.
- For one central straight pipe with a width of $\ell/3$ transporting the same quantity of fluid, the theoretical dissipation function is equal to $2.40 \times 10^{-8} W$. Even if this value is unrealistic since it does not take into account the position of inlet and outlet flow boundary conditions, it provides an order of magnitude underlining the interest of unifying both flows.

Consequently, it must exist a critical value of the domain length, called L_c , for which the geometry switches from 2 straight pipes to an unified one. Assuming that the dissipation function $f_d(L)$ is strictly increasing for both configurations, and according to their above-mentioned values, it can be reasonably claimed that this change occurs for $1.0 < L_c/\ell \leq 1.08$.



(a) Physical and geometrical configurations of the double pipe case. Length L is a variable parameter.



(b) Result of topology optimization for $L = \ell$ (48×48 design parameter grid).



(c) Result of topology optimization for $L = 1.5\ell$ (72×48 design parameter grid).

Figure 5.9: Total dissipated power minimization for two different cases of double pipe.

5.4.4 Single pipe with constant wall temperature

The three examples above show a good adequacy of FVM in the frame of topology optimization with the previous results of the dedicated scientific literature. Therefore, the final example of this article includes the energy equation and deals with the objective function f_d , as well as the recoverable thermal power function f_r , by means of a bi-objective approach. The case studied is a square-shaped domain of side ℓ , displayed in Fig. 5.10, and includes several thermal boundary conditions. The inlet flow is located in the center of the west edge, with a parabolic u -velocity profile, and a length of $\ell/5$. The inlet temperature is fixed to $T_i = 0^\circ\text{C}$. The outlet flow is line up with it on the east edge, with the same velocity profile, but the outflow temperature condition is fixed to a zero gradient, meaning that the thermal heat flux is only convected, and not conducted, by the fluid to leave the system. In addition, the 4 walls constituting the rest of west and east edges are assumed to be adiabatic, whereas the whole north and south walls are subject to a constant temperature $T_w = 10^\circ\text{C}$. The Reynolds number based on the characteristic dimension $\ell/5$ and the average inlet velocity and is $Re = 3$. The thermal parameters are the following: $k_s = 10 \text{ W}/(\text{m.K})$, $k_f = 1.0 \text{ W}/(\text{m.K})$, and $C_p = 5.0 \text{ kJ}/(\text{kg.K})$. In addition, the maximal global porosity is set such as $\varphi(\eta) \leq 0.4$.

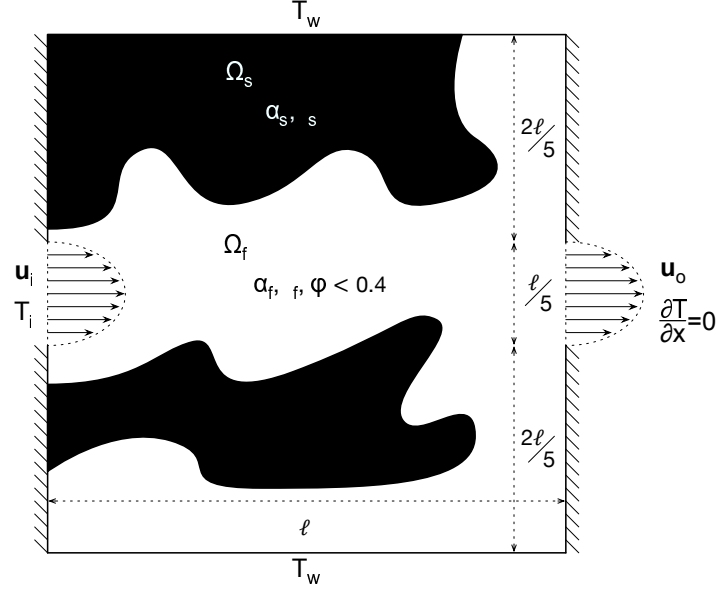


Figure 5.10: Physical and geometrical configurations of the single-pipe case, with top and bottom constant wall temperature.

Figure 5.11 displays the results of bi-objective optimization, which have been reached by discretizing $w \in [0, 1]$ in Eq. (5.32) with 101 elements, after rescaling each objective function according to Eq. (5.31). From left to right and top to bottom, it shows the evolution of weightings w from 0 to 1, *i.e.* from minimizing f_d to maximizing f_r , as underlined by the value of the objective functions under each structure. From Fig. 5.11, five steps can be distinguished from the structure evolution:

- For $0.0 \leq w < 0.06$, the fluid is transported through a single and straight pipe, as depicted on Fig. 5.11a. Note that the subdomain Ω_f is as wide as allowed by the constraint $\varphi(\boldsymbol{\eta}) \leq \bar{\varphi}$ in order to minimize the shears inside the fluid flow.
- for $0.06 \leq w < 0.42$, a solid core takes place at the center of the domain, splitting the fluid subdomain into a lower and an upper flows, as shown from Figs. 5.11b to 5.11f. This moves both flows towards the north and south walls at constant temperature T_w , namely closer to the warm areas, in order to heat up the fluid without the temperature losses induced by the heat flux conduction through the solid domain. The more the f_r weighting increases, the more the central core width increases to force the fluid along the top and bottom walls.
- For $0.42 \leq w < 0.60$, the central core is vertically split in two sub-cores, as shown on Figs. 5.11g, 5.11h and 5.11i. This behavior breaks the horizontal temperature gradient through the solid core, by inserting a strip of fluid acting like a heat insulation material. Deeper investigations about this feature are conducted below.
- For $0.60 \leq w < 0.87$, Figs 5.11j and 5.11k illustrate that the core fragmentation can go one step further, by splitting the central part up to 3 sub-cores for the exact same physical motivations.
- For $0.87 \leq w \leq 1.0$, no fluid connection is made between the inlet and outlet flows: the fluid is forced through the porous media, as shown on Fig. 5.11l, despite the impact on the objective function f_d . Consequently, this is the physical limit of the α parametrization and these solutions only make sense from a mathematical point of view.

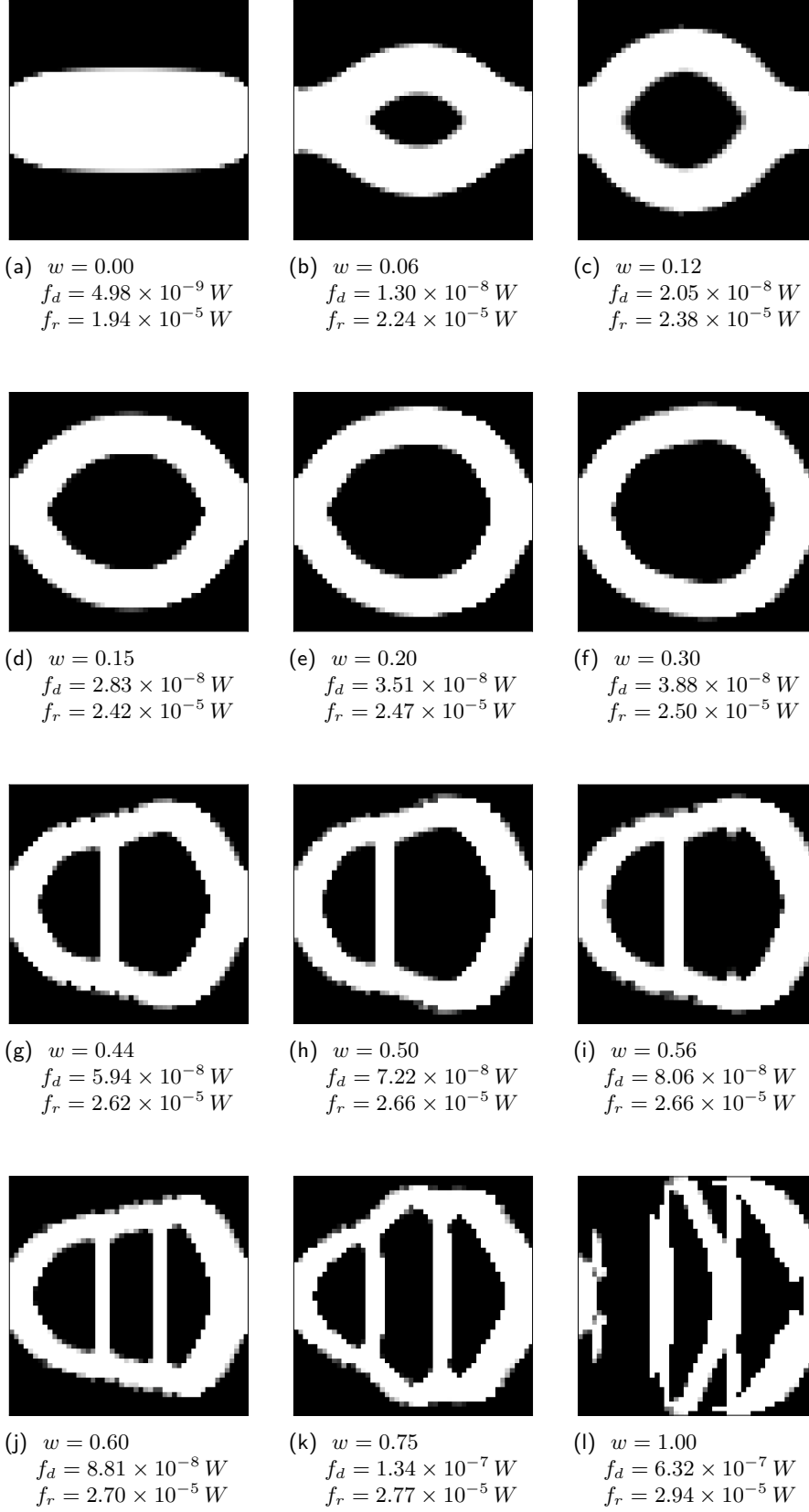


Figure 5.11: Single pipe with constant wall temperature: structures going from f_d minimization to f_r maximization sorted by weighting w .

Multiobjective optimization also aims at identifying the Pareto frontier, as introduced in subsection 5.3.3.3 and shown in Fig. 5.12. The Pareto set of the current example is definitely convex and can therefore be reached from AOF method. Only the non dominated solutions actually reaching it are displayed over the 101 different weightings, since some calculations fail to provide satisfactory results due to the numerical errors coming both from the direct solver or the optimization algorithm. However, the fundamental point highlighted by Fig. 5.12 is the optimality of a few solutions, thanks to the convex shape of the Pareto front. Indeed, the weightings around $w = 0.5$ provide structures having both f_d minimum and f_r maximum close to their single objective optimization. For instance, as mentioned in Fig. 5.11h, $f_d(w = 0.5) = 7.22 \times 10^{-8} W$ which is only 13.5% higher than the straight pipe configuration and $f_r(w = 0.5) = 2.66 \times 10^{-5} W$, which is 9.5% lower than the maximal thermal recoverable power. In other words, this configuration is an acceptable trade-off between the flow derivation and the core fragmentation, leading to a result that is not trivial from a structural point of view.

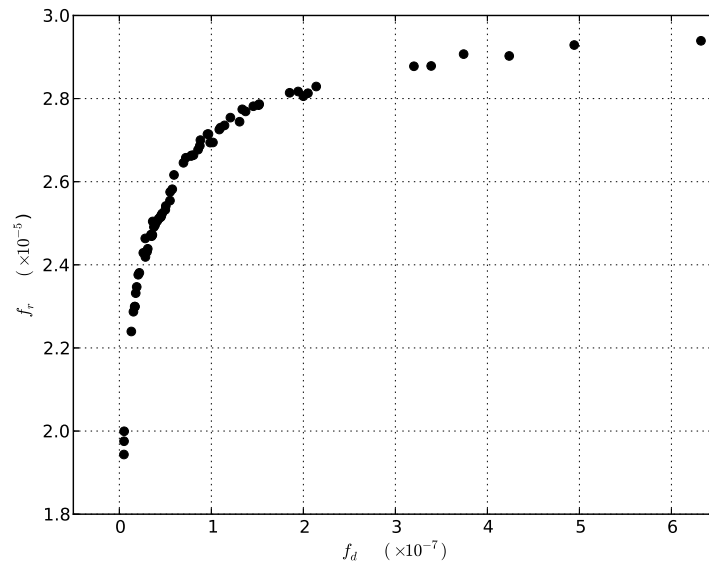


Figure 5.12: Single pipe with constant wall temperature: Pareto frontier ($\min f_d$, $\max f_r$).

Figure 5.13 demonstrates the interest of splitting the central core in several different parts. The structure reached for $w = 0.60$ is modified in order to visualize the thermal differences resulting from reunifying their central core. The strips of fluid are filled with solid ($\eta = 0$) to create a revised version of the optimal structure, as shown in Fig. 5.13c, and the velocity, pressure and temperature fields are solved again. It is worth noting that this process involved to remove fluid cells from the domain and lead to inactivate the constraint $\varphi(\eta) \leq 0.4$. As a result, the aggregated objective function f increases from -0.475 to -0.447 and the recoverable thermal power drops from $2.70 \times 10^{-5} W$ to $2.61 \times 10^{-5} W$ ($\approx 3.3\%$). The reduction of f_r objective function does not come from a modification of the energy transport process, since the additional solid parts do not modify the velocity field. However, as displayed on Figs. 5.13b and 5.13d, the core temperature field is deeply affected by these structural changes: without the strips of fluid acting like an insulation material, an horizontal thermal gradient takes place through the core, leading the heat flux from the near outlet flow area to the near inlet flow one: consequently, the outlet flow is cooled by conduction through the central core. In other words, dividing the central part allows the temperature homogenization for each subset by restricting heat conduction, and therefore ensures that both extreme parts are mainly under the influence of their closest thermal boundary condition.

Fig. 5.13a also underlines that the more the objective function f_r becomes predominant ($w \rightarrow 1$), the more the fluid/solid interfaces become rough. The successive iterations of the optimization process oscillate between adding some additional solid cells along these interfaces in order to drive the heat flux as close as possible of the high-velocity zones, and enlarging the channel in order to reduce the power dissipated by the fluid motion. The solution reached is a trade-off having the interfaces made of porous regions driving the heat flux towards the flow with an higher thermal conductivity than the fluid one, but being less restrictive for the fluid shears than pure solid cells. This duality illustrates the main problematic of heat and mass transfers, which is increasing the thermal heat exchange with the fluid, while reducing as far as possible the power required to set it in motion.

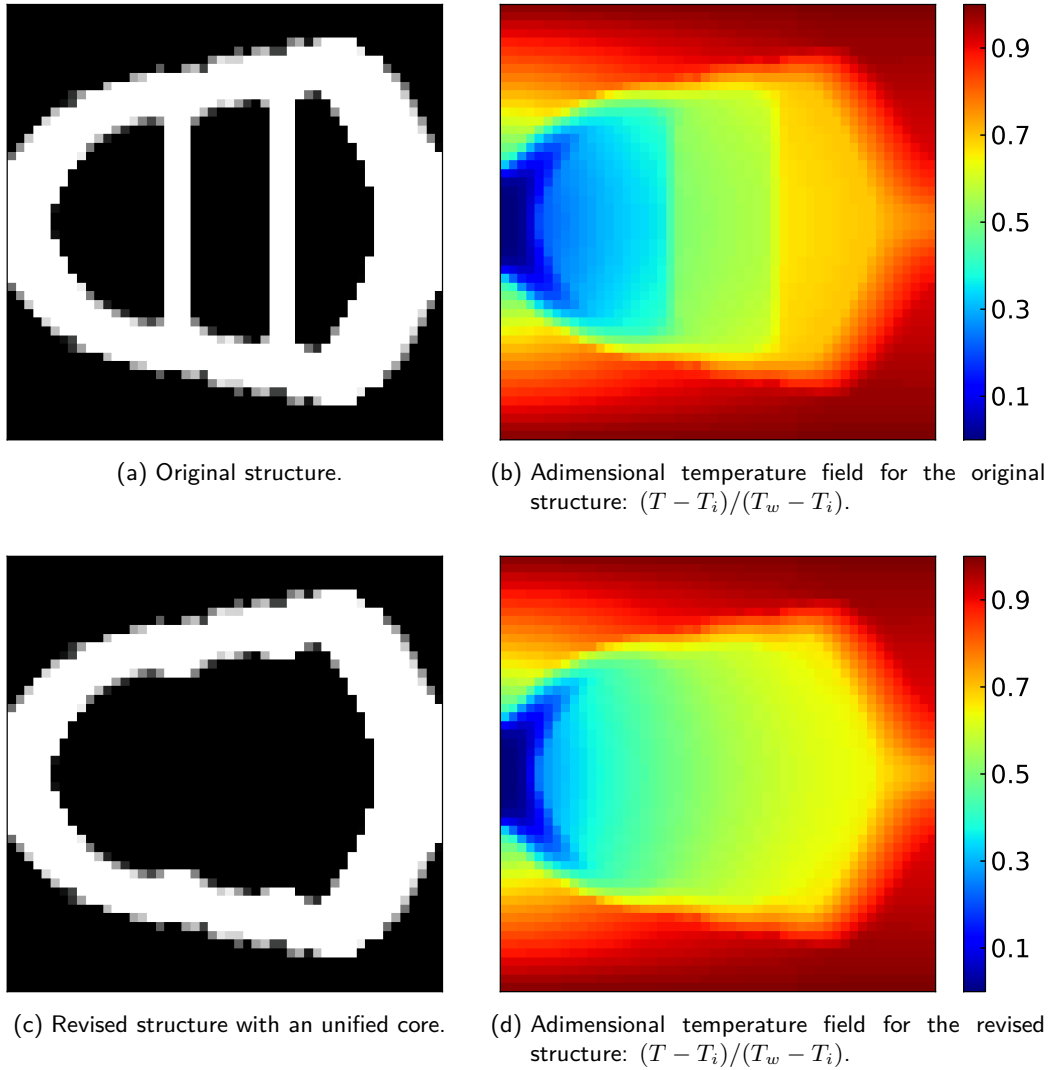


Figure 5.13: Qualitative performance analysis of structure reached for $w = 0.60$, revised with an unified core.

5.5 Conclusion and perspectives

Many engineering problems in the frame of heat and mass transfers involve the design of efficient geometries to satisfy cost reduction constraints or to reach specific thermal conditions in order to fulfill quality requirements. However, a very few methodologies exist to assist the decision-maker through the design process and to help him determining which features are crucial to optimize the structure performances. For various scientific fields, topology optimization has shown outstanding abilities to create structures without any mindset and complying with the optimization of some objective functions. This article is a first step to bring this method into the conductive and convective heat transfer field and demonstrate its potential in terms of engineering design.

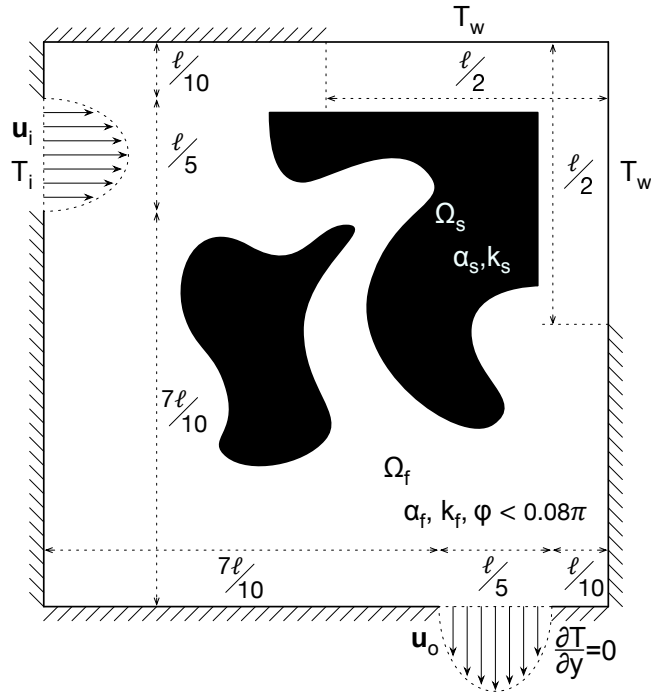
With that aim, the present article focus on three main points. 1) It investigates the application of FVM in conjunction with topology optimization for computational fluid dynamic problems, since this specific numerical method is widely used in the industrial field, due to its relative simplicity and its robustness. 2) The energy equation based on a variable thermal conductivity is introduced and linked to the optimization problem. This parametrization affects the discrete adjoint equation aiming at evaluating the sensitivity by considerably enlarging the adjoint system. 3) After adequately rescaling each objective function, they are aggregated using a linear combination to fully take into account the bi-objective nature of heat and mass transfer problems. Assuming that the Pareto front is convex, this allows determining the whole set on non dominated solutions.

Making comparisons with the results coming from the dedicated scientific literature, in the frame of the dissipated power minimization, the present results underline the appropriateness of the method developed through this article. Since the use of finite volume discretization does not falsify the topology optimization process, the method can be taken a step forwards by adding a thermal objective function. The bi-objective results, taking the form of a Pareto set, show four different classes of realistic solutions based on different topologies, namely on a different way to connect the solid elements between them. As expected, some designs lie on non-trivial features, which could be seen as an innovative basis for building an engineering response to the problem tackled.

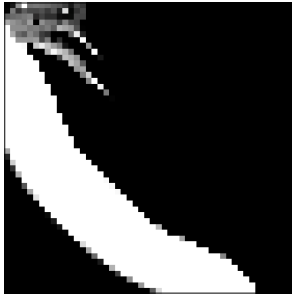
These works also open several new investigations: for instance, the role of the internal heat generation rate has not been tackled and could be fruitful for investigating the design of new heat exchangers. In addition, this article gives no consideration of the influence of the Reynolds number on the designs and further researches must be conducted in this direction. However, they will require the implementation of adequate strategies for the derivative evaluations, since more stable numerical discretization schemes, such as UDS or QUICK, should be applied to the FVM.

5.6 Limitations de l'approche par homogénéisation

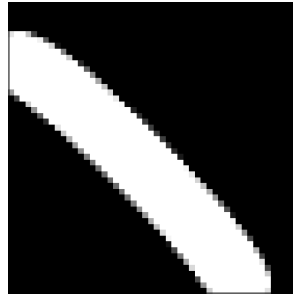
Bien que la section 5.4.4 souligne la bonne adéquation du paramétrage poreux et de la conductivité thermique variables pour aborder le problème de l'optimisation de la conduction et du transport du flux de chaleur, celui-ci peut être mis en difficulté dans certains cas. La figure 5.14a présente la même configuration que celle étudiée dans la section 5.4.2, c'est-à-dire un coude assurant une rotation de 90° du fluide, mais dont le coin Nord-Est est désormais soumis à une température constante $T_w = 10^\circ C$, les autres conditions limites thermiques des murs restant adiabatiques. Par ailleurs, l'entrée du fluide est caractérisée par $T_i = 0^\circ C$ et la sortie est soumise à un gradient de température nul, de sorte que seule l'énergie convectée puisse quitter le domaine Ω . De plus, les conductivités thermiques des deux sous-domaines sont les suivantes : $k_f = 10 W/(m.K)$ et $k_s = 1 W/(m.K)$, ce qui implique que le matériau solide agit comme un isolant thermique, *a contrario* de la configuration étudiée dans la section 5.4.4. Les fonctions objectif étudiées restent identiques à celles présentées précédemment : le



(a) Configuration physique et géométrique d'un coude soumis à une température constante.



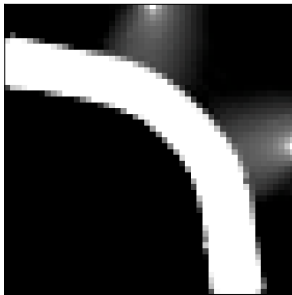
(b) $\min f_r$ seulement
 $f_d = 4.77 \times 10^{-8} W$
 $f_r = 2.79 \times 10^{-6} W$



(c) $w = 0.00$
 $f_d = 2.46 \times 10^{-8} W$
 $f_r = 3.61 \times 10^{-6} W$



(d) $w = 0.20$
 $f_d = 2.80 \times 10^{-8} W$
 $f_r = 5.81 \times 10^{-6} W$



(e) $w = 0.50$
 $f_d = 5.64 \times 10^{-8} W$
 $f_r = 1.46 \times 10^{-5} W$



(f) $w = 0.75$
 $f_d = 1.01 \times 10^{-7} W$
 $f_r = 2.67 \times 10^{-5} W$



(g) $w = 1.00$
 $f_d = 1.58 \times 10^{-7} W$
 $f_r = 2.82 \times 10^{-5} W$

FIGURE 5.14 – Coude soumis à une température constante dans son coin Nord-Est : structures obtenues à partir de la minimisation de f_d et la maximisation de f_r soulignant la limitation du modèle poreux dans l'optimisation du transport du flux de chaleur.

problème bi-objectif vise à minimiser la puissance dissipée par le fluide f_d en maximisant la puissance thermique récupérée f_r .

La figure 5.14b présente la structure obtenue en minimisant uniquement f_r , qui forme un léger coude inversé visant à éloigner le fluide des zones chaudes, tout en minimisant son temps de résidence à travers le domaine Ω . Les figures 5.14 (c à g) représentent les différentes solutions en fonction de la pondération w qui varient de 0 à 1. Trois étapes distinctes peuvent être analysées :

- pour $w = 0$, la structure est similaire en tout point aux résultats présentés dans la section 5.4.2.
- pour $0 < w < 1$, le coude se déforme progressivement pour approcher le fluide des zones chaudes, afin de maximiser l'énergie transportée par ce dernier. Cette longueur de parcours supplémentaire dans le domaine se fait au détriment de la dissipation visqueuse, comme souligné par les valeurs croissantes de la fonction objectif f_d .
- pour $w = 1$, c'est-à-dire pour la maximisation pure de f_r sans considération sur f_d , le fluide forme un coude épousant le coin Nord-Est, et dont les extrémités sont fermées avec du matériau poreux.

Pour les configurations intermédiaires (d à f), des zones poreuses apparaissent au milieu des arêtes Nord et Est : ce phénomène est particulièrement flagrant sur la figure 5.14e où celles-ci s'étendent jusqu'à la limite de l'interface fluide/solide. Ces zones étant cernées par du matériau solide, le fluide qu'elles contiennent est caractérisé par une vitesse nulle et leur existence ne se justifie donc pas par un quelconque phénomène de transport de chaleur. En revanche, leur conductivité thermique k est supérieure à k_s , permettant de conduire le flux de chaleur avec une résistance moins importante que celle engendrée par le matériau solide. Le système ainsi formé minimise la dissipation visqueuse en réduisant le trajet du fluide au sein de Ω , tout en maximisant la température sur l'interface Nord du coude en conduisant la chaleur au mieux à travers les zones poreuses. Il faut souligner que ce phénomène intervient quelles que soient les valeurs des paramètres de pénalisation p_f et p_e , aussi larges soient-elles.

En inversant les conductivités thermiques k_s et k_f , plus aucun problème de ce type n'intervient dans le processus de convergence. Des études complémentaires montrent également que le cas présenté dans la section 5.4.4 adopte un comportement différent si les valeurs de k_s et k_f sont permutées. La formation de zones poreuses à travers le domaine solide est donc la limitation principale de l'approche proposée ici et des recherches complémentaires doivent être conduites pour établir une stratégie conduisant à leur suppression.

5.7 Conclusion à propos de l'optimisation des transferts de masse et de chaleur

Ce chapitre a présenté une déclinaison possible de l'optimisation topologique pour les transferts de masse et de chaleur, en suivant la même philosophie que celle introduite dans le chapitre 4. Bien que certains résultats soient prometteurs et non triviaux, des limitations inhérentes au paramétrage utilisé ont été mises en évidence. Néanmoins, il apparaît que, dans le cadre des fonctions objectif abordées ici, ces insuffisances soient principalement dues au fait que $k_s < k_f$, une hypothèse physiquement non réaliste si des considérations d'ordre technologique sont prises en compte. En effet, les matériaux constituant les échangeurs thermiques sont très souvent constitués de métaux possédant des conductivités thermiques bien supérieures à celles des fluides les traversant.

Cet article conclut les recherches menées dans le cadre de cette thèse en soulevant de nombreuses questions. Sans même aborder la problématique des écoulements turbulents, il paraît probable que le régime de l'écoulement, caractérisé par son nombre de Reynolds, a une influence significative sur les structures optimales. Des études [63] ayant souligné que cette influence était avérée dans le cadre de la minimisation de la puissance totale dissipée par le fluide, il est plus que probable que celle-ci existe également dans un contexte bi-objectif fluide/thermique. Cette investigation ne pourra s'effectuer qu'en s'appuyant sur des schémas numériques plus fiables, qui requerront dès lors d'être dérivés pour être intégrés au problème adjoint. De plus, toujours en considérant une configuration d'écoulement laminaire et stationnaire, la possibilité d'organiser la matière dans une troisième dimension ouvrirait un large champ d'investigations, du fait du degré de liberté supplémentaire des configurations tridimensionnelles.

Chapitre 6

Conclusion et perspectives

6.1 Conclusion

La présente thèse a exploré différents paradigmes de l'optimisation de structures soumises à des échanges de chaleur, dans des configurations purement conductives en première approche. Outre la théorie constructale qui mêle une optimisation de taille au sens strict du terme à des connexions topologiques arbitraires, deux types de méthode ont été abordés : l'optimisation topologique se basant sur un critère local et l'optimisation topologique fondée sur une méthode à gradient, en reprenant la typologie présentée dans l'introduction. La complexité algorithmique des approches testées croît au fil du manuscrit, entraînant systématiquement un coût de calcul plus important, mais engendrant également des solutions plus performantes et plus structurées.

Une comparaison entre les quatre types de méthode est effectuée sur la base du refroidissement d'un volume fini générant de la chaleur, dont les bordures sont adiabatiques à l'exception d'un petit segment à température constante. Chaque algorithme organise à sa manière la même quantité de matériau hautement conducteur, qui est une fraction du volume total, afin d'évacuer au mieux le flux de chaleur généré. Deux valeurs différentes de porosité sont examinées et les résultats sont présentés figures 4.21 et 4.22. L'analyse des structures obtenues met en lumière deux approches établissant un réseau de matière hautement conductrice rayonnant spatialement à partir du puits du chaleur, en adéquation physique avec la problématique : l'optimisation topologique par attraction locale du gradient et la méthode dite « *Solid Isotropic Material with Penalization* » (SIMP). Une quantification précise des performances, sur la base de la même stratégie de maillage et du même solveur numérique, met par ailleurs en exergue les excellents résultats de cette dernière méthode, qui est par conséquent sélectionnée en vue de l'optimisation d'écoulements sujets à des transferts de chaleur conducto-convectifs.

Cependant, le transfert de la stratégie de pénalisation aux écoulements fluides, en conjonction avec la méthode des volumes finis, nécessite des précautions supplémentaires, notamment pour prendre en compte avec précision la dissipation visqueuse le long des interfaces fluides/solides. Les résultats de cette approche, proposés chapitre 5, sont comparés à ceux disponibles dans la littérature scientifique dans le cas de la simple minimisation de la puissance dissipée par le fluide. Ces rapprochements confirment la bonne adéquation des régularisations proposées et permettent d'envisager l'optimisation d'une configuration réalisant à la fois la minimisation de la puissance fluide dissipée et la maximisation de l'énergie thermique récupérée sur le système. L'analyse du front de Pareto formé par les résultats permet d'identifier quatre classes de solutions réalistes et topologiquement non-triviales, soulignant le potentiel de l'approche développée. Néanmoins, ces résultats sont à tempérer en raison de la mise en lumière de limitations inhérentes au paramétrage.

6.2 Perspectives

L'ensemble des configurations étudiées, indépendamment de la méthode d'optimisation examinée, repose tout au long du manuscrit sur deux hypothèses : la bidimensionnalité de la géométrie, considérant que les paramètres physiques suivant une dimension sont invariants, et la stationnarité du problème, permettant de négliger les termes temporels. Ces deux hypothèses visent uniquement à simplifier le problème dans le but de limiter les ressources de calcul nécessaires à sa résolution, permettant ainsi de concentrer les efforts de développement sur son couplage avec la méthode d'optimisation. Ces restrictions ne sont donc pas dues à des barrières théoriques physiques ou mathématiques et une évolution naturelle de chaque code de calcul serait de tendre à l'inclusion progressive de composantes tridimensionnelles, puis instationnaires. Les coûts de calcul additionnels engendrés par ces nouvelles variables pourraient être limités en parallélisant certaines parties du code, afin de rester dans des temps d'évaluation raisonnables.

6.2.1 Automates cellulaires

Bien que les solutions élaborées par les automates cellulaires semblent être optimales sur le plan structurel, tant leur mimétisme avec des configurations naturelles est avéré, celles-ci présentent des performances thermiques décevantes, notamment pour de faibles porosités. Malgré les précautions prises section 3.1.4.2, ce manque peut principalement être attribué au défaut de continuité au sein de la structure hautement conductrice et des efforts supplémentaires sont encore à produire pour le combler. Néanmoins, les défauts de symétrie des structures atteintes suggèrent l'existence d'une seconde voie d'amélioration possible, en repensant l'algorithme afin d'assurer une convergence plus régulière et plus structurée. Pour ce faire, une piste s'inspirant du traitement des *checkerboards* par la méthode SIMP est envisagée, incluant à la suite de l'étape de permutations des automates cellulaires un filtre visant à réduire les discontinuités dans la structure. La principale difficulté de cette approche, qui se doit d'effectuer ce filtrage en tenant compte de l'aspect binaire des cellules, est d'agglomérer de façon trop précoce l'ensemble du matériau hautement conducteur, réduisant trop rapidement la structure à un amas de matière compact et informe.

Par ailleurs, le potentiel des automates cellulaires semble également exploitable dans le cadre de l'optimisation d'écoulements, en s'appuyant sur un critère local adéquat pour mouvoir les éléments solides au sein du fluide. A titre d'exemple, celui-ci pourrait être la contrainte pariétale à laquelle chaque automate est soumis lorsqu'il est au contact de l'écoulement. S'il s'avérait qu'une telle approche fonctionne, l'étape suivante serait de considérer une combinaison linéaire des critères locaux, dans la lignée de la démarche proposée dans le cadre de l'optimisation bi-objectif. Ainsi, l'inclusion du flux de chaleur en tant que critère de permutation supplémentaire pourrait mener à une pseudo-optimisation multi-objectif, sous réserve que ce critère soit mis à l'échelle pour être du même ordre de grandeur que celui portant sur le fluide, de sorte que leur combinaison ait un sens. Une telle optimisation tirerait sans aucun doute parti de la vitesse de convergence importante des automates cellulaires.

6.2.2 Méthodes d'homogénéisation

Les approches par homogénéisation, ou pénalisation selon les cas, reposent toutes sur une méthode d'optimisation numérique qui exploite la sensibilité de la fonction objectif pour établir une solution plus performante, chacune d'entre elles constituant une étape d'un processus itératif global. La méthode sélectionnée dans les chapitres 4 et 5 est celle dite des asymptotes mobiles (MMA), qui a démontré ses excellentes capacités pour l'optimisation topologique de structures en mécanique des solides en premier lieu [2], puis en mécanique des fluides [56]. L'implémentation qui en est faite ici repose sur les travaux de Svanberg [129, 130], mais n'utilise pas de variables intermédiaires qui permettent notamment d'initialiser les structures en dehors de leur zone de contrainte. Comme souligné

par Borrvall et Petersson dans le cas de l'optimisation d'écoulements fluides [56], une convergence plus rapide est obtenue si le domaine est initialisé uniquement avec du fluide, mettant ainsi en exergue les gradients de vitesse responsables de la puissance dissipée. Pour ce faire, la structure doit violer la contrainte portant sur la porosité maximale autorisée par le domaine et l'algorithme de la méthode des asymptotes mobiles doit pouvoir gérer un tel choix.

Pour pallier ce problème, il est envisagé d'implémenter une version plus complète de la méthode MMA, appelée *Globally Convergent Method of Moving Asymptotes* (GCMMA) [122], en s'appuyant sur des variables intermédiaires qui permettront d'initialiser la structure en dehors de sa zone de contraintes. De plus, cette approche réinitialise les asymptotes mobiles qui définissent la taille de l'intervalle sur lequel l'approximation convexe du sous-problème est réalisée, lorsque certains critères estiment que l'algorithme tend vers un optimum local. La méthode a été utilisée avec succès par Kreissl *et al.* [77], dans le cadre de l'optimisation d'écoulements fluides stationnaires.

6.2.2.1 Optimisation des transferts de chaleur par conduction

Le problème académique dit « *volume-to-point* » (VP) introduit par Bejan dans le cadre de l'approche constructale [83] a été largement abordé dans la première partie de la thèse, puisqu'il a servi de référence pour comparer les performances des algorithmes entre eux. Dans le cadre d'une problématique purement conductive, le problème VP est plus intéressant à traiter qu'un problème aux frontières qui est généralement résolu en liant les conditions limites non-adiabatiques les unes aux autres, comme présenté figures 4.20b et 4.20d. L'inclusion d'un taux de génération de chaleur volumique au sein du domaine oblige le réseau de matériau hautement conducteur à tenter de relier le puits de chaleur à chacun des éléments la produisant. Cependant, il apparaît possible de reformuler la problématique initiale de Bejan pour obtenir une version plus complète du problème VP :

Considérons deux matériaux en quantité finie et dont les frontières sont adiabatiques, quelles que soient leur topologie. Le premier matériau est sujet à un taux de génération de chaleur constant, tandis que le second est constitué de matière hautement conductrice. Une faible portion de l'espace est à température constante (puits de chaleur). Quelle est la meilleure distribution des deux matériaux minimisant la moyenne de température de l'ensemble du système ?

En d'autres termes, un degré de liberté supplémentaire est ajouté au problème initial, considérant qu'au-delà de l'optimisation de la structure hautement conductrice, la topologie même du matériau générant de la chaleur est à reconsidérer. De plus, la notion de résistance thermique totale est requalifiée en moyenne de température, afin de conserver l'idée de minimiser la résistance au flux entre chaque point du domaine et le puits de chaleur. Ce problème s'avère complexe à résoudre algorithmiquement, puisqu'il requiert l'examen des connexions possibles entre trois domaines ayant des caractéristiques différentes : le matériau générant de la chaleur, le matériau hautement conducteur et un matériau dont la conductivité thermique tend vers zéro, permettant de simuler la condition d'adiabaticité le long des frontières.

La seconde perspective mise en lumière par l'optimisation topologique de structures conductives, et notamment avec la possibilité d'aborder des thématiques multi-objectifs au moyen de la méthode *SIMP*, est l'optimisation de structures assurant le stockage de l'énergie. En se basant sur le même paramétrage, mais en intégrant le terme stationnaire de l'équation de la chaleur, il semble possible de déterminer la forme d'un insert hautement conducteur assurant la répartition optimale du flux de chaleur au sein d'un matériau solide assurant son stockage. Un modèle, prenant en compte un matériau à changement de phase pourrait être également envisagé, afin de déterminer la topologie permettant de tirer parti des possibilités supplémentaires offertes par la chaleur latente de fusion. Par ailleurs, en liant la problématique énoncée au paragraphe précédent au stockage d'énergie, et

moyennant des ressources calculatoires assez conséquentes, il semble possible d'envisager la conception d'un organe stockant de la chaleur dont chaque élément aura été le sujet d'une optimisation spécifique à son rôle : transport ou stockage.

6.2.2.2 Optimisation des transferts de masse et de chaleur

Dans le cadre de l'optimisation du seul transfert de masse à travers un domaine, la méthode développée est restreinte par les conditions limites imposées sur les entrées et les sorties fluides. En effet, pour l'instant, seuls des flux de matière entrant et sortant de façon normale au domaine peuvent être considérés, puisque la fonction objectif traduisant la puissance dissipée par le fluide prend uniquement en compte la différence de pression totale dans l'écoulement. Dans l'optique d'aborder des configurations plus réalistes, des conditions limites supplémentaires doivent être implémentées, représentant une pression constante ou une sortie fluide quelconque. Dès lors, la fonction objectif doit aussi prendre en compte l'énergie consacrée à la déformation des particules fluides en sortie, puisque rien ne garantit plus que l'écoulement quitte orthogonalement le domaine. La fonction objectif doit donc se baser également sur le tenseur des taux des déformations et il est nécessaire d'évaluer la dérivée de ce dernier pour établir le membre de droite du solveur adjoint.

Enfin, comme souligné dans la conclusion du chapitre 5, le développement et la dérivation de schémas numériques plus précis, amont ou *QUICK* par exemple, semblent indispensables pour examiner la variation structurelle des optima engendrés par la variation du régime d'écoulement. Cet examen pourra être conduit dans le cas laminaire dans un premier temps, puis être porté dans le cas d'un régime turbulent en implémentant, et en dérivant, les modèles de fermeture adéquats [96]. Dès lors, il apparaît que la preuve de concept présentée dans le cadre de l'optimisation des transferts de masse et de chaleur ouvre un champ d'investigation bien plus large et prometteur que les seuls travaux présentés dans ce manuscrit.

Références bibliographiques

- [1] J. Vargas and A. Bejan. Thermodynamic optimization of finned crossflow heat exchangers for aircraft environmental control systems. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 22(6):657–665, 2001.
- [2] M. Bendsoe and O. Sigmund. *Topology Optimization: Theory, Methods and Applications*. Springer, 2nd edition, 2003.
- [3] S. Rao. *Engineering Optimization: Theory and Practice*. John Wiley & Sons, 2009.
- [4] K. Deb. *Multi-Objective Optimization Using Evolutionary Algorithms*. Wiley, 1 edition, 2001.
- [5] P. J. M. van Laarhoven and E. H. L. Aarts. *Simulated Annealing: Theory and Application*. D. Reidel, Dordrecht, 1987.
- [6] A. Griewank and A. Walther. *Evaluating derivatives: principles and techniques of algorithmic differentiation*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2008.
- [7] S. Boyd and L. Vandenberghe. *Convex Optimization*. Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2004.
- [8] J. Nocedal and S. Wright. *Numerical Optimization*. Springer Publishing Company, 2nd edition, 2006.
- [9] A. Antoniou and W.-S. Lu. *Practical Optimization: Algorithms and Engineering Applications*. Springer Publishing Company, 1st edition, 2007.
- [10] B. Mohammadi and O. Pironneau. *Applied Shape Optimization for Fluids*. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford University Press, USA, 2001.
- [11] J. Periaux, L. Gonzales, E. Whitney, and K. Srinivas. MOO methods for multidisciplinary design using parallel evolutionary algorithms, game theory and hierarchical topology: Theoretical background. In *Introduction to Optimization and Multidisciplinary Design*. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 2006.
- [12] M. Sasikumar and C. Balaji. Optimization of convective fin systems: a holistic approach. *Heat and Mass Transfer*, 39(1):57–68, 2002.
- [13] H.-M. Kim and K.-Y. Kim. Design optimization of rib-roughened channel to enhance turbulent heat transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(23):5159–5168, 2004.
- [14] R. Bialecki, T. Burczynski, A. Dlugosz, W. Kus, and Z. Ostrowski. Evolutionary shape optimization of thermoelastic bodies exchanging heat by convection and radiation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(17):1839–1859, 2005.
- [15] J. Porter, M. Larsen, J. Barnes, and J. Howell. Metaheuristic optimization of a discrete array of radiant heaters. *Journal of Heat Transfer*, 128(10):1031–1040, 2006.

- [16] K.-T. Chiang and F.-P. Chang. Application of response surface methodology in the parametric optimization of a pin-fin type heat sink. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 33(7):836–845, 2006.
- [17] H.-M. Kim and K.-Y. Kim. Shape optimization of three-dimensional channel roughened by angled ribs with RANS analysis of turbulent heat transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(21-22):4013–4022, 2006.
- [18] N. Sahiti, F. Durst, and P. Geremia. Selection and optimization of pin cross-sections for electronics cooling. *Applied Thermal Engineering*, 27(1):111–119, 2007.
- [19] A. Husain and K.-Y. Kim. Optimization of a microchannel heat sink with temperature dependent fluid properties. *Applied Thermal Engineering*, 28(8-9):1101–1107, 2008.
- [20] K.-Y. Kim and D.-Y. Shin. Optimization of a staggered dimpled surface in a cooling channel using Kriging model. *International Journal of Thermal Sciences*, 47(11):1464–1472, 2008.
- [21] P. Li and K.-Y. Kim. Multiobjective optimization of staggered elliptical pin-fin arrays. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 53(4):418–431, 2008.
- [22] M. Mishra, P. Das, and S. Sarangi. Second law based optimisation of crossflow plate-fin heat exchanger design using genetic algorithm. *Applied Thermal Engineering*, 29(14-15):2983–2989, 2009.
- [23] G. Wang, G. Zhao, H. Li, and Y. Guan. Research on optimization design of the heating/cooling channels for rapid heat cycle molding based on response surface methodology and constrained particle swarm optimization. *Expert Systems with Applications*, 38(6):6705–6719, 2011.
- [24] A. Yilmaz, O. Büyükalaca, and T. Yilmaz. Optimum shape and dimensions of ducts for convective heat transfer in laminar flow at constant wall temperature. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 43(5):767–775, 2000.
- [25] B. Kundu. Performance and optimum design analysis of longitudinal and pin fins with simultaneous heat and mass transfer: Unified and comparative investigations. *Applied Thermal Engineering*, 27(5-6):976–987, 2007.
- [26] Z.-H. Wang, X.-D. Wang, W.-M. Yan, Y.-Y. Duan, D.-J Lee, and J.-L Xu. Multi-parameters optimization for microchannel heat sink using inverse problem method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54(13-14):2811–2819, 2011.
- [27] J. Von Wolfersdorf, E. Achermann, and B. Weigand. Shape optimization of cooling channels Using genetic algorithms. *Journal of Heat Transfer*, 119(2):380–388, 1997.
- [28] G. Fabbri. A genetic algorithm for fin profile optimization. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40(9):2165–2172, 1997.
- [29] G. Fabbri. Optimization of heat transfer through finned dissipators cooled by laminar flow. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 19(6):644–654, 1998.
- [30] G. Fabbri. Heat transfer optimization in internally finned tubes under laminar flow conditions. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 41(10):1243–1253, 1998.
- [31] G. Fabbri. Optimum performances of longitudinal convective fins with symmetrical and asymmetrical profiles. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 20(6):634–641, 1999.
- [32] G. Fabbri. Heat transfer optimization in corrugated wall channels. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 43(23):4299–4310, 2000.

- [33] T. Lehnhäuser and M. Schäfer. A numerical approach for shape optimization of fluid flow domains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(50-52):5221–5241, 2005.
- [34] K. Foli, T. Okabe, M. Olhofer, Y. Jin, and B. Sendhoff. Optimization of micro heat exchanger: CFD, analytical approach and multi-objective evolutionary algorithms. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(5-6):1090–1099, 2006.
- [35] R. Hilbert, G. Janiga, R. Baron, and D. Thévenin. Multi-objective shape optimization of a heat exchanger using parallel genetic algorithms. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(15-16):2567–2577, 2006.
- [36] M. Cavazzuti and M. A. Corticelli. Optimization of heat exchanger enhanced surfaces through multiobjective Genetic Algorithms. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 54(6):603–624, 2008.
- [37] F. Bobaru and S. Rachakonda. Optimal shape profiles for cooling fins of high and low conductivity. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(23):4953–4966, 2004.
- [38] R. Schneider. *Application of the discrete adjoint method in Computational Fluid Dynamics*. PhD thesis, University of Leeds, School of Computing, 2006.
- [39] Z. Gao and Y. Ma. Shape gradient of the dissipated energy functional in shape optimization for the viscous incompressible flow. *Applied Numerical Mathematics*, 58(11):1720–1741, 2008.
- [40] C.-H. Cheng, C.-K. Chan, and G.-J. Lai. Design for wall shape profile of a millimeter-scale air-heating channel by integrating three-dimensional CFD code with optimization methods. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 53(9):982–1000, 2008.
- [41] S.-H. Ha and S. Cho. Level set-based topological shape optimization of nonlinear heat conduction problems. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 54(6):454–475, 2008.
- [42] Z. Gao, Y. Ma, and H. Zhuang. Shape optimization for Stokes flow. *Applied Numerical Mathematics*, 58(6):827–844, 2008.
- [43] X.-B. Duan, Y.-C. Ma, and R. Zhang. Shape-topology optimization for Navier-Stokes problem using variational level set method. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 222(2):487–499, 2008.
- [44] X.-B. Duan, Y.-C. Ma, and R. Zhang. Shape-topology optimization of stokes flow via variational level set method. *Applied Mathematics and Computation*, 202(1):200–209, 2008.
- [45] M. Errera and A. Bejan. Deterministic tree networks for river drainage basins. *Fractals*, 6(3):245–261, 1998.
- [46] Q. Li, G. Steven, O. Querin, and Y. Xie. Shape and topology design for heat conduction by Evolutionary Structural Optimization. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 42(17):3361–3371, 1999.
- [47] Z.-Z. Xia, Z.-X. Li, and Z.-Y. Guo. Heat conduction optimization: high conductivity constructs based on the principle of biological evolution. In Proceedings of the Twelfth International Heat Transfer Conference, editor, *Heat Transfer*, Grenoble, France, 2002. Elsevier SAS.
- [48] Z. Guo, X. Cheng, and Z. Xia. Least dissipation principle of heat transport potential capacity and its application in heat conduction optimization. *Chinese Science Bulletin*, 48(4):406–410, 2003.

- [49] X. Cheng, Z. Li, and Z. Guo. Constructs of highly effective heat transport paths by bionic optimization. *Science in China (serie E)*, 46(3):296–302, 2003.
- [50] Q. Li, G. Steven, Y. Xie, and O. Querin. Evolutionary topology optimization for temperature reduction of heat conducting fields. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(23):5071–5083, 2004.
- [51] F. Mathieu-Potvin and L. Gosselin. Optimal conduction pathways for cooling a heat-generating body: A comparison exercise. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50(15-16):2996–3006, 2007.
- [52] R. Boichot, L. Luo, and Y. Fan. Tree-network structure generation for heat conduction by cellular automaton. *Energy Conversion and Management*, 50(2):376–386, 2009.
- [53] X. Xu, X. Liang, and J. Ren. Optimization of heat conduction using combinatorial optimization algorithms. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50(9-10):1675–1682, 2007.
- [54] H. Pedro, M. Kobayashi, C. Coimbra, and A. da Silva. Effectiveness of complex design through an evolutionary approach. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 22(1):115–118, 2008.
- [55] B. Song and Z. Guo. Robustness in the volume-to-point heat conduction optimization problem. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54(21-22):4531–4539, 2011.
- [56] T. Borrvall and J. Petersson. Topology optimization of fluids in Stokes flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 41(1):77–107, 2003.
- [57] A. Evgrafov. The limits of porous materials in the topology optimization of Stokes Flows. *Applied Mathematics and Optimization*, 52(3):263–277, 2005.
- [58] A. Gersborg-Hansen, O. Sigmund, and R. Haber. Topology optimization of channel flow problems. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 30(3):181–192, 2005.
- [59] A. Gersborg-Hansen, M. Bendsoe, and O. Sigmund. Topology optimization of heat conduction problems using the finite volume method. *Structural and multidisciplinary optimization*, 31(4):251–259, 2006.
- [60] J. Guest and J. Prévost. Topology optimization of creeping fluid flows using a Darcy–Stokes finite element. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 66:461–484, 2006.
- [61] C. Othmer. CFD Topology and shape optimization with adjoint methods. In *Berechnung und Simulation im Fahrzeugbau*. VDI Fahrzeug- und Verkehrstechnik, 2006.
- [62] C. Othmer, T. Kaminski, and R. Giering. Computation of topological sensitivities in Fluid dynamics: cost function versatility. In *European Conference on Computational Fluid Dynamics*. Volkswagen AG, Numerical Analysis E1, Letter Box 1697, D-38436 Wolfsburg, 2006.
- [63] L. Olesen, F. Okkels, and H. Bruus. A high-level programming-language implementation of topology optimization applied to steady-state Navier-Stokes flow. *International Journal For Numerical Methods In Engineering*, 65:975–1001, 2006.
- [64] N. Wiker, A. Klarbring, and T. Borrvall. Topology optimization of regions of Darcy and Stokes flow. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 69(7):1374–1404, 2007.
- [65] T. Bruns. Topology optimization by penalty (TOP) method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(45-48):4430–4443, 2007.

- [66] C. Zhuang, Z. Xiong, and H. Ding. A level set method for topology optimization of heat conduction problem under multiple load cases. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(4-6):1074–1084, 2007.
- [67] T. Bruns. Topology optimization of convection-dominated, steady-state heat transfer problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50(15-16):2859–2873, 2007.
- [68] C. Othmer. A continuous adjoint formulation for the computation of topological and surface sensitivities of ducted flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 58(8):861–877, 2008.
- [69] S. Zhou and Q. Li. A variational level set method for the topology optimization of steady-state Navier-Stokes flow. *Journal of Computational Physics*, 227(24):10178–10195, 2008.
- [70] Y. Zhang and S. Liu. Design of conducting paths based on topology optimization. *Heat and Mass Transfer*, 44(10):1217–1227, 2008.
- [71] T. Gao, W. Zhang, J. Zhu, Y. Xu, and D. Bassir. Topology optimization of heat conduction problem involving design-dependent heat load effect. *Finite Elements in Analysis and Design*, 44(14):805–813, 2008.
- [72] M. Abdelwahed, M. Hassine, and M. Masmoudi. Optimal shape design for fluid flow using topological perturbation technique. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 356(2):548–563, 2009.
- [73] C. Anflor and R. Marczak. A boundary element approach for topology design in diffusive problems containing heat sources. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52(19-20):4604–4611, 2009.
- [74] A. Iga, S. Nishiwaki, K. Izui, and M. Yoshimura. Topology optimization for thermal conductors considering design-dependent effects, including heat conduction and convection. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52(11-12):2721–2732, 2009.
- [75] S.-H. Ahn and S. Cho. Level set-based topological shape optimization of heat conduction problems considering design-dependent convection boundary. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 58(5):304–322, 2010.
- [76] G. H. Yoon. Topological design of heat dissipating structure with forced convective heat transfer. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 24(6):1225–1233, 2010.
- [77] S. Kreissl, G. Pingen, and K. Maute. Topology optimization for unsteady flow. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2011.
- [78] C. Hinterberger and M. Olesen. Industrial application of continuous adjoint flow solvers for the optimization of automotive exhaust systems. In ECCOMAS, editor, *CFD & Optimization*, Antalya, Turkey, 2011.
- [79] E. M. Papoutsis-Kiachagias, E. A. Kontoleonos, A. S. Zymaris, D. I. Papadimitriou, and K. C. Giannakoglou. Constrained topology optimization for laminar and turbulent flows, including heat transfer. In CIRA, editor, *EUROGEN, Evolutionary and Deterministic Methods for Design, Optimization and Control*, Capua, Italy, 2011.
- [80] A. Evgrafov, M. M. Gregersen, and M. P. Sorensen. Convergence of cell based finite volume discretizations for problems of control in the conduction coefficients. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 45(6):1059–1080, June 2011.

- [81] E. A. Kontoleonos, E. M. Papoutsis-Kiachagias, A. S. Zymaris, D. I. Papadimitriou, and K. C. Giannakoglou. Adjoint-based constrained topology optimization for viscous flows, including heat transfer. *Engineering Optimization*, pages 1–21, 2012.
- [82] L. Gosselin, M. Tye-Gingras, and F. Mathieu-Potvin. Review of utilization of genetic algorithms in heat transfer problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52(9-10):2169–2188, 2009.
- [83] A. Bejan. Constructal-theory network of conducting paths for cooling a heat generating volume. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40(4):799–811, 1997.
- [84] A. Bejan. Constructal theory: from thermodynamic and geometric optimization to predicting shape in nature. *Energy Conversion and Management*, 39(16-18):1705–1718, 1998.
- [85] A. Bejan and D. Tondeur. Equipartition, optimal allocation, and the constructal approach to predicting organization in nature. *Revue Générale de Thermique*, 37(3):165–180, 1998.
- [86] A. Bejan. How nature takes shape: extensions of constructal theory to ducts, rivers, turbulence, cracks, dendritic crystals and spatial economics. *International Journal of Thermal Sciences*, 38(8):653–663, 1999.
- [87] A. Bejan, V. Badescu, and A. de Vos. Constructal theory of economics structure generation in space and time. *Energy Conversion and Management*, 41(13):1429–1451, 2000.
- [88] J. Lewins. Bejan's constructal theory of equal potential distribution. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46(9):1541–1543, 2003.
- [89] L. Ghodoossi. Conceptual study on constructal theory. *Energy Conversion and Management*, 45(9-10):1379–1395, 2004.
- [90] A. Bejan and S. Lorente. Constructal theory of generation of configuration in nature and engineering. *Journal of Applied Physics*, 100(4):41301, 2006.
- [91] L. Kuddusi and N. Egrican. A critical review of constructal theory. *Energy Conversion and Management*, 49(5):1283–1294, 2008.
- [92] A. Bejan and S. Lorente. The constructal law of design and evolution in nature. *Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences*, 365(1545):1335–1347, 2010.
- [93] A. Bejan. *Advanced Engineering Thermodynamics*. John Wiley & Sons, 3rd edition, 2006.
- [94] D. L. Book, J. P. Boris, J. Fritts, R. V. Madala, B. E. McDonald, N. K. Winsor, and S. T. Zalesak. *Finite-Difference Techniques for Vectorized Fluid Dynamics Calculations*. Scientific Computation Series. Springer, 2012.
- [95] S. Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Series in computational methods in mechanics and thermal sciences. Taylor & Francis, 1980.
- [96] H. Versteeg and W. Malalasekera. *An introduction to computational fluid dynamics - The finite volume method*. Pearson Education Limited, Harlow, 2nd edition, 2007.
- [97] O. Zienkiewicz, R. Taylor, and P. Nithiarasu. *The Finite Element Method for Fluid Dynamics*. Butterworth-Heinemann, 6th edition, 2005.
- [98] G. Marck, J.-L. Harion, M. Nemer, S. Russeil, and D. Bougeard. A new perspective of constructal networks cooling a finite-size volume generating heat. *Energy Conversion and Management*, 52(2):1033–1046, 2011.

- [99] M. Almogbel and A. Bejan. Conduction trees with spacings at the tips. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 42(20):3739–3756, 1999.
- [100] M. Almogbel and A. Bejan. Constructal optimization of nonuniformly distributed tree-shaped flow structures for conduction. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44(22):4185–4194, 2001.
- [101] S. Zhou, L. Chen, and F. Sun. Optimization of constructal volume-point conduction with variable cross section conducting path. *Energy Conversion and Management*, 48(1):106–111, 2007.
- [102] L. Ghodoossi and N. Egrican. Exact solution for cooling of electronics using constructal theory. *Journal of Applied Physics*, 93(8):4922–4929, 2003.
- [103] W. Wu, L. Chen, and F. Sun. On the area-to-point flow problem based on constructal theory. *Energy Conversion and Management*, 48(1):101–105, 2007.
- [104] L. Kuddusi and J. Denton. Analytical solution for heat conduction problem in composite slab and its implementation in constructal solution for cooling of electronics. *Energy Conversion and Management*, 48(4):1089–1105, 2007.
- [105] L. Ghodoossi. Entropy generation rate in uniform heat generating area cooled by conducting paths: criterion for rating the performance of constructal designs. *Energy Conversion and Management*, 45(18-19):2951–2969, 2004.
- [106] W. Wu, L. Chen, and F. Sun. Heat-conduction optimization based on constructal theory. *Applied Energy*, 84(1):39–47, 2007.
- [107] A. Bejan and N. Dan. Two Constructal Routes to Minimal Heat Flow Resistance via Greater Internal Complexity. *Journal of Heat Transfer*, 121(1):6–14, 1999.
- [108] L. Rocha, S. Lorente, and A. Bejan. Conduction tree networks with loops for cooling a heat generating volume. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(15-16):2626–2635, 2006.
- [109] M. Eslami and K. Jafarpur. Thermal resistance in conductive constructal designs of arbitrary configuration: A new general approach. *Energy Conversion and Management*, 57:117–124, 2012.
- [110] S. Tescari, N. Mazet, and P. Neveu. Constructal theory through thermodynamics of irreversible processes framework. *Energy Conversion and Management*, 52(10):3176–3188, 2011.
- [111] S. Wolfram. *A New Kind of Science*. Wolfram Media, 2002.
- [112] S. Wolfram. Statistical mechanics of cellular automata. *Reviews of Modern Physics*, 55(3):601–644, 1983.
- [113] E. R. Berlekamp, J. H. Conway, and R. K. Guy. *Winning ways for your mathematical plays*, volume 4 of *Winning Ways for Your Mathematical Plays*. A.K. Peters, 2004.
- [114] X. Huang and M. Xie. *Evolutionary Topology Optimization of Continuum Structures: Methods and Applications*. John Wiley & Sons, 2010.
- [115] P. Lascaux and R. Théodor. *Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur*. Dunod, 2000.

- [116] A. Bejan. *Entropy Generation Minimization: The Method of Thermodynamic Optimization of Finite-Size Systems and Finite-Time Processes*. CRC's mechanical engineering series. Taylor & Francis, 1995.
- [117] G. Marck, M. Nemer, J.-L. Harion, S. Russeil, and D. Bougeard. Evolutionary structural optimization by extension to cool a finite-size volume generating heat. In *7th International Conference on Computational Heat and Mass Transfer*, page 152, Istanbul, 2011.
- [118] G. Marck, M. Nemer, J.-L. Harion, S. Russeil, and D. Bougeard. Topology optimization using the SIMP method for multiobjective conductive problems. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 61(6):439–470, June 2012.
- [119] A. da Silva and L. Gosselin. The numerical optimization of a Neumann-type boundary for the Graetz problems. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 59(8):577–593, 2011.
- [120] M. R. Golbahar Haghighi, P. Malekzadeh, and H. Rahideh. Three-dimensional transient optimal boundary heating of functionally graded plates. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 59(1):76–95, 2011.
- [121] A. Bensefia, M. Boussaid, and T. Loulou. Optimal heat input for estimating Luikov's parameters in a heat and mass transfer problems. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 60(5):399–423, 2011.
- [122] K. Svanberg. A class of globally convergent optimization methods based on conservative convex separable approximations. *SIAM Journal on Optimization*, 12(2):555–573, 2002.
- [123] J. Cohon. *Multiobjective Programming and Planning*. Dover Publications, 2004.
- [124] T. W. Athan and P. Y. Papalambros. A note on weighted criteria methods for compromise solutions in multi-objective optimization. *Engineering Optimization*, 27(2):155–176, 1996.
- [125] C. Hillermeier. *Nonlinear multiobjective optimization: a generalized homotopy approach*. International series of numerical mathematics. Birkhäuser Verlag, Basel - Boston - Berlin, 2001.
- [126] E. Dede. Multiphysics topology optimization of heat transfer and fluid flow systems. In *COMSOL Conference*, 2009.
- [127] H. A. V. van der Vorst. BI-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 13(2):631–644, 1992.
- [128] X. S. Li, J. W. Demmel, J. R. Gilbert, L. Grigori, and M. Shao. SuperLU Users Guide, 2010.
- [129] K. Svanberg. The Method of Moving Asymptotes – A new method for structural optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24:359–373, 1987.
- [130] K. Svanberg. The Method of Moving Asymptotes – Modelling aspects and solution schemes, 1998.

Optimisation Topologique des Transferts de Chaleur et de Masse

- Application aux Échangeurs de chaleur -

Résumé : Les transferts de chaleur et de masse sont deux phénomènes physiques à la base de nombreux systèmes thermiques employés dans des secteurs variés tels que l'industrie, le bâtiment ou encore les énergies renouvelables. Les présents travaux de recherche envisagent différentes méthodologies d'optimisation de configurations assurant le transfert de flux de chaleur, couplé ou non à un écoulement fluide, au sens topologique du terme. Les équations aux dérivées partielles décrivant les phénomènes physiques sont discrétisées avec la méthode des volumes finis. La première partie du manuscrit examine successivement trois classes différentes de méthodes : la théorie constructale, les automates cellulaires et les méthodes par pénalisation. Le même cas académique, portant sur le refroidissement d'un volume fini générant de la chaleur, est résolu au moyen de ces trois méthodes, ce qui permet ainsi de comparer les performances de chaque algorithme. Cette comparaison démontre l'ascendant des méthodes par pénalisation sur les deux premiers types, tant structurellement que quantitativement, et permet également d'établir des solutions basées sur des compromis dans le cadre d'optimisations multi-objectifs. Par conséquent, la seconde partie envisage l'application de cette approche à des configurations réalisant des transferts de chaleur conducto-convectifs en régime laminaire. L'utilisation de paramètres de pénalisation en conjonction avec les volumes finis requiert une régularisation de la dissipation visqueuse le long de l'interface fluide/solide. Une approche bi-objectif est développée visant à minimiser la puissance dissipée par le fluide, tout en maximisant l'énergie thermique récupérée sur le système. Les solutions obtenues adoptent des configurations non-triviales qui sont divisibles en quatre classes topologiques différentes. La thèse ouvre ainsi un nouveau champ d'investigation pour l'optimisation d'écoulements couplés à la problématique du transport de chaleur.

Mots clés : Transferts de Chaleur et de Masse, Optimisation topologique, Théorie constructale, Automates cellulaires, SIMP.

Topology Optimization of Heat and Mass Transfer

- Application to Heat Exchangers -

Abstract: Heat and mass transfers are two physical phenomena at the base of many thermal systems involved in various fields, such as industries, buildings or renewable energies. The present researches tackle different optimization methodologies of structures subject to heat transfers, coupled with a fluid flow or not, in the topological sense of the term. The partial differential equations describing the physical phenomena are discretized thanks to the finite volume method. The first part of the thesis successively studies three different classes of approaches: constructal theory, cellular automaton, and the solid isotropic material with penalization method. The same academic case, aiming at the optimal cooling of a finite-size volume generating heat, is tackled by means of these three methods, allowing the comparison of the performances of each algorithm. This comparison shows that the method based on the material penalization performs better than the first two approaches, structurally and quantitatively, and also establishes solutions based on a trade-off in the frame multi-objective optimization. Consequently, the second part applies this method to configurations subject to heat and mass transfers with laminar flows. The use of penalization parameters in conjunction with the finite volume method requires a regularization of the viscous dissipation along the solid/fluid interfaces. A bi-objective approach is implemented in order to minimize the total power dissipated by the fluid, while maximizing the thermal energy recovered from the system. The solutions show non-trivial configurations that can be categorized in four different topological classes. The present researches open a new investigation field for fluid flows coupled with the problem of heat transport.

Keywords: Heat and mass transfer, Topology optimization, Constructal theory, Cellular automaton, SIMP.

